

Synthese neuer Carboxylate durch Oxidation von Metallen mit Liebig-Säuren

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität zu Köln

vorgelegt von
Sonia Gomez Torres
aus Neuss

Köln 2007

Berichterstatter: Prof. Dr. G. Meyer
Prof. Dr. A. Klein

Tag der mündlichen Prüfung: 21.11.2007

Die experimentellen Untersuchungen zur vorliegenden Arbeit wurden in der Zeit von Januar 2006 bis Juni 2007 unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Gerd Meyer im Institut für Anorganische Chemie der Universität zu Köln durchgeführt.

Kurzdarstellung

Ziel dieser Arbeit war die Darstellung und vollständige Charakterisierung homoleptischer Carboxylate der Essigsäure, der Propionsäure und der Benzoesäure von Übergangsmetallen, bestehend aus Acetaten der Seltenerdmetalle und Propionaten sowie Benzoaten dieser Elemente sowie weiterer Übergangsmetalle der vierten Reihe des Periodensystems der Elemente. Einige dieser Verbindungen enthalten in ihrer Kristallstruktur koordinierende Säuremoleküle, z.B. $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$, sowie freie Säure- und/oder Wassermoleküle, z.B. $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$, die unter Ausbilden von Wasserstoffbrückenbindungen deren Stabilität prägen.

Bei der Herstellung ist auf die klassische Synthese aus Lösungen der Übergangsmetallsalze verzichtet worden. Stattdessen wurden die jeweiligen Metalle direkt bei milden Temperaturen mit der jeweiligen wasserfreien (min. 99 %) Carbonsäure in evakuierten Duranglasampullen oxidiert. Im Einklang mit der Definition einer Säure nach Liebig, werden die Wasserstoffatome unter Reduktion zu Wasserstoff gegen Metallatome ausgetauscht. Auf diese Weise ist eine kontrollierte Kristallisation der Carboxylate unter milden Reaktionsbedingungen bei einem vorgegebenen Temperaturprogramm möglich. Die Propionate $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ und $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$ wurden zunächst in eine Schlenkvorrichtung überführt und kristallisierten beim Entweichen der überschüssigen Säure. Bei stöchiometrischer Umsetzung des Metalls mit der jeweiligen Carbonsäure zum Carboxylat konnten auf diese Weise phasenreine Produkte erhalten und für weitere spektroskopische und magnetische Messungen verwendet werden.

Es wurde auf die Zusammensetzung durch Wahl der Stöchiometrie Einfluss genommen, wie durch die Europiumacetate $\text{Eu}(\text{OAc})_3$, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ und $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$ bzw. -benzoate $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ verdeutlicht werden soll. Der Einsatz von Malonsäure ist eine weitere Möglichkeit Acetate herzustellen, wie die Gewinnung des bisher noch unbekannten Neodymacetats $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ zeigt. Dieses konnte bislang auf direktem Wege nicht erhalten werden. Malonsäure decarboxyliert jedoch oberhalb von 140°C zu Essigsäure. Ein Gemisch aus Benzoe- und Salicylsäure zeigte sich als Reaktionsmedium zur Herstellung von Kristallen der Seltenerdbenzoate $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ und $\text{Ho}(\text{OBz})_3$, die auf direktem Wege so nicht zugänglich waren. Insgesamt sind 21 neue Übergangsmetallcarboxylate hergestellt worden.

Abstract

The aim of this work was the synthesis and characterization of homoleptic carboxylates of transition metals. Acetic acid, propionic acid and benzoic acid were used as carboxylic acids. As transition metals the rare earth elements and fourth period elements of the periodic table of the elements were applied. Some of these compounds contain acid molecules as ligands, for example $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$, as well as non-coordinating acid and/or water molecules in acetates, for example $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$, that stabilize the crystal structure by hydrogen bonds.

Contrary to the classical solvent synthesis of transition metal salts a direct reaction between the respective metal and the respective anhydrous acid was carried out at mild temperatures in evacuated glass ampoules, as is usual in solid state chemistry. Corresponding to the definition of an acid by Liebig, the hydrogen atoms of the acid were replaced under reduction to hydrogen by metal atoms. In this way the crystallization of the respective carboxylates succeeded under mild reaction conditions by a controlled program of temperature. The propionates $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ and $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$ were transferred to a Schlenk-like glass device and crystallized after evaporation of the propionic acid. It is possible to obtain pure samples of these carboxylates by stoichiometric reactions of the metal with the respective acid. These can be used for spectroscopic and magnetic measurements.

To obtain different structures, the reaction was also influenced by change of stoichiometry, as the examples of the acetates $\text{Eu}(\text{OAc})_3$, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ and $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$ and the benzoates $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ may show. The action of malonic acid is another excellent route to acetates. The hitherto unknown $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ was obtained from neodymium and malonic which decomposes above 140°C under decarboxylation to acetic acid. A mixture of benzoic and salicylic acid is ideal to secure crystals of the rare earth benzoates $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ und $\text{Ho}(\text{OBz})_3$, which were not available by the direct reaction. Altogether it was possible to synthesize 21 new carboxylates of transition metals.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	-1-
2	Allgemeine Arbeitsmethoden	-3-
2.1	Physikalische Methoden	-3-
2.1.1	Röntgendiffraktometrie	-3-
2.1.1.1	<i>Einkristallstrukturbestimmung</i>	-3-
2.1.1.2	<i>Pulverdiffraktometrie</i>	-9-
2.1.2	Spektroskopie	-10-
2.1.2.1	<i>Infrarot- und Raman-Spektroskopie</i>	-10-
2.1.2.2	<i>Mößbauerspektroskopie</i>	-13-
2.1.2.3	<i>Lumineszenzspektroskopie</i>	-14-
2.1.3	Thermoanalyse	-15-
2.1.4	Rasterelektronenmikroskopie	-16-
2.1.5	Energiedispersive Röntgenanalytik	-17-
2.1.6	Magnetismus	-17-
2.2	Chemische Arbeitsmethoden	-20-
2.2.1	Allgemeines zur Synthese	-20-
2.2.2	Verzeichnisse	-24-
2.2.2.1	<i>Geräteverzeichnis</i>	-24-
2.2.2.2	<i>Chemikalienverzeichnis</i>	-25-
2.2.2.3	<i>Programmeverzeichnis</i>	-26-
3	Eigenschaften von Carbonsäuren	-27-
3.1	Definition einer Liebig-Säure	-27-
3.2	Eigenschaften von Carbonsäuren	-27-
3.3	Eigenschaften der verwendeten Säuren	-28-
3.3.1	Essigsäure (HOAc)	-28-
3.3.2	Malonsäure	-29-
3.3.3	Propionsäure (HOPr)	-30-
3.3.4	Benzoessäure (HOBz)	-31-
3.3.5	Salicylsäure	-32-
3.4	Beschreibung der Koordination in Carboxylaten	-33-

4 Neue Übergangsmetallcarboxylate	-36-
4.1 Wasserfreie Seltenerdacetate	-36-
4.1.1 Einleitung	-36-
4.1.2 Neodymacetat, $\text{Nd}(\text{OAc})_3$	-37-
4.1.2.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-37-
4.1.2.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-49-
4.1.3 Europiumacetat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3$	-50-
4.1.3.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-50-
4.1.3.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-53-
4.1.4 Thulium- und Ytterbiumacetat, $\text{SE}(\text{OAc})_3$	-54-
4.1.4.1 <i>Synthese und Kristallstrukturen</i>	-54-
4.1.4.2 <i>Pulverdiffraktogramme</i>	-58-
4.1.5 IR- und Ramanspektrum	-59-
4.2 Wasserhaltige Seltenerdacetate	-61-
4.2.1 Einleitung	-61-
4.2.2 Neodym-, Samarium- und Erbiumacetathydrate, $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$	-63-
4.2.2.1 <i>Synthese und Kristallstrukturen</i>	-63-
4.2.2.2 <i>Pulverdiffraktogramme</i>	-69-
4.2.3 Europiumacetathydrat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$	-71-
4.2.3.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-71-
4.2.3.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-75-
4.2.4 IR- und Ramanspektren	-75-
4.3 Essigsäurehaltige Seltenerdacetate	-78-
4.3.1 Einleitung	-78-
4.3.2 Neodym- und Samariumacetat-Essigsäure-Addukte, $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2$	-80-
4.3.2.1 <i>Synthese und Kristallstrukturen</i>	-80-
4.3.2.2 <i>Pulverdiffraktogramme</i>	-84-
4.3.2.3 <i>IR- und Ramanspektren</i>	-85-
4.3.3 Dysprosiumacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$	-87-
4.3.3.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-87-
4.3.3.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-91-
4.3.3.3 <i>IR- und Ramanspektrum</i>	-91-
4.4 Propionate	-93-
4.4.1 Einleitung	-93-
4.4.2 Eisenpropionat, $\text{Fe}(\text{OPr})_2$	-94-
4.4.2.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-94-
4.4.2.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-100-
4.4.2.3 <i>IR- und Ramanspektrum</i>	-100-

4.4.3 Neodympropionat-Propionsäure-Addukt, $\text{Nd(OPr)}_3(\text{HOPr})$	-102-
4.4.3.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-102-
4.4.3.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-106-
4.4.3.3 <i>IR- und Ramanspektrum</i>	-106-
4.5 Benzoate	-108-
4.5.1 Einleitung	-108-
4.5.2 Eisenbenzoat, Fe(OBz)_2	-108-
4.5.2.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-108-
4.5.2.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-112-
4.5.3 Praseodymbenzoat, Pr(OBz)_3	-113-
4.5.3.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-113-
4.5.4 Gadoliniumbenzoat, Gd(OBz)_3	-117-
4.5.4.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-117-
4.5.4.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-122-
4.5.5 Holmiumbenzoat, Ho(OBz)_3	-123-
4.5.5.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-123-
4.5.6 IR- und Ramanspektrum	-128-
4.6 Benzoessäurehaltige Benzoate	-130-
4.6.1 Einleitung	-130-
4.6.2 Manganbenzoat-Benzoessäure-Addukt, $\text{Mn(OBz)}_2(\text{HOBz})_{2/7}$	-131-
4.6.2.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-131-
4.6.2.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-136-
4.6.3 Praseodymbenzoat-Benzoessäure-Addukt, $\text{Pr(OBz)}_3(\text{HOBz})_2$	-137-
4.6.3.1 <i>Synthese und Kristallstruktur</i>	-137-
4.6.3.2 <i>Pulverdiffraktogramm</i>	-141-
4.6.4 Europiumbenzoat-Benzoessäure-Addukte, $\text{Eu(OBz)}_{2,5}(\text{HOBz})$ und $\text{Eu(OBz)}_3(\text{HOBz})_{0,5}$	-142-
4.6.4.1 <i>Synthese und Kristallstrukturen</i>	-142-
4.6.4.2 <i>Pulverdiffraktogramme</i>	-149-
4.6.5 IR- und Ramanspektren	-151-
5 Spezielle Untersuchungen an ausgewählten Verbindungen	-154-
5.1 Magnetismus	-154-
5.1.1 Eisenbenzoat, Fe(OBz)_2	-154-
5.1.2 Manganbenzoat-Benzoessäure-Addukt, $\text{Mn(OBz)}_2(\text{HOBz})_{2/7}$	-156-
5.1.3 Europiumbenzoat-Benzoessäure-Addukt, $\text{Eu(OBz)}_{2,5}(\text{HOBz})$	-158-
5.2 Mößbauerspektroskopie	-160-
5.2.1 Eisenbenzoat, Fe(OBz)_2	-160-
5.2.2 Europiumbenzoat-Benzoessäure-Addukt, $\text{Eu(OBz)}_{2,5}(\text{HOBz})$	-162-

5.3 Lumineszenzspektroskopie	-163-
5.3.1 Europiumacetathydrat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$	-165-
5.3.2 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$	-167-
5.4 Thermoanalyse	-169-
5.4.1 Thermisches Verhalten von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$	-169-
5.4.2 Thermisches Verhalten von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$	-171-
5.4.3 Thermisches Verhalten von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$	-172-
5.5 Untersuchungen mittels REM und EDX	-173-
5.5.1 Nanoteilchen im Zersetzungsprodukt Eu_2O_3	-173-
5.5.2 Temperaturabhängigkeit der Partikelgröße	-175-
6 Zusammenfassung und Diskussion	-177-
7 Literaturverzeichnis	-188-
8 Anhang (Atomkoordinaten, äquivalente und anisotrope Temperaturfaktoren, Atomabstände und Winkel)	-191-
8.1 Acetate	-191-
8.1.1 Neodymacetat, $\text{Nd}(\text{OAc})_3$	-191-
8.1.2 Europiumacetat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3$	-208-
8.1.3 Thuliumacetat, $\text{Tm}(\text{OAc})_3$	-211-
8.1.4 Ytterbiumacetat, $\text{Yb}(\text{OAc})_3$	-213-
8.2 Acetathydrate	-215-
8.2.1 Neodymacetathydrat, $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$	-215-
8.2.2 Samariumacetathydrat, $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$	-219-
8.2.3 Erbiumacetathydrat, $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$	-223-
8.2.4 Europiumacetathydrat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$	-227-
8.3 Acetat-Essigsäure-Addukte	-231-
8.3.1 Neodymacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2$	-231-
8.3.2 Samariumacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2$	-234-
8.3.3 Dysprosiumacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$	-237-
8.4 Propionate	-240-
8.4.1 Eisenpropionat, $\text{Fe}(\text{OPr})_2$	-240-
8.4.2 Neodympropionat-Propionsäure-Addukt, $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$	-243-

8.5 Benzoate	-248-
8.5.1 Eisenbenzoat, $\text{Fe}(\text{OBz})_2$	-248-
8.5.2 Praseodymbenzoat, $\text{Pr}(\text{OBz})_3$	-251-
8.5.3 Gadoliniumbenzoat, $\text{Gd}(\text{OBz})_3$	-257-
8.5.4 Holmiumbenzoat, $\text{Ho}(\text{OBz})_3$	-265-
8.6 Benzoat-Benzoesäure-Addukte	-279-
8.6.1 Manganbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$	-279-
8.6.2 Praseodymbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$	-286-
8.6.3 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$	-290-
8.6.4 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$	-297-
9 Danksagung	-304-
Eidesstattliche Erklärung	-305-
Publikationen / Tagungsbeiträge	-306-

1 Einleitung

Der Bereich der Übergangsmetallcarboxylate umfasst ein breites Spektrum von Verbindungen. Unter diesen sind Carboxylate der Lanthanoide von großem Interesse. Sie finden als Katalysatoren Anwendung in der Synthese organischer Verbindungen und von Naturstoffen, da sie ungewöhnliche, hohe Koordinationszahlen annehmen und zusätzlich eine hohe Lewis-Acidität zeigen. Besonders wird ihre Anwendung durch die Lumineszenz geprägt. Diese Eigenschaft, Energie zu speichern und sogar erst bei Anregung durch z.B. Wärme wieder zu emittieren, kann durch die Wahl des Liganden beeinflusst werden und findet vielseitige Anwendung wie z.B. in Computerbildschirmen. Eine weitere wichtige Eigenschaft mancher Übergangsmetallcarboxylate ist der Magnetismus, d.h. die Metallzentren treten über ihre Liganden als diamagnetische Brücken in einem äußeren magnetischen Feld in Wechselwirkung.

Im Rahmen dieser Arbeit sind verschiedene Acetate, Propionate und Benzoate der Übergangsmetalle hergestellt und mittels röntgenographischer, spektroskopischer und magnetischer Methoden charakterisiert worden. Zur Synthese wurde in Analogie zur Definition einer Säure nach Liebig verfahren. Liebig bezeichnet als Säure eine Wasserstoffverbindung, in der Wasserstoff durch Metallatome ersetzbar ist, wie z.B. gemäß $\text{Zn} + 2\text{HCl} = \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$. Diese Definition schließt jede Verbindung mit ein, die über Wasserstoffatome verfügt und deren Acidität ausreicht, um ein unedles Metall zu oxidieren, wie z.B. organische Verbindungen mit den funktionellen Gruppen -OH und -NH. Es werden auch Verbindungen eingeschlossen, die im Allgemeinen nicht als Säure betrachtet werden, wie z.B. CH_4 und davon abgeleitet die Verbindungen LiCH_3 und Be_2C . Die Umsetzung einer Liebig-Säure mit einem unedlen Metall läuft generell als Redoxreaktion ab und führt im optimalen Fall zum reinen Salz dieser Säure und dem entweichenden Wasserstoff [1].

Die bekannten Seltenerdacetate wurden meist aus essigsauren Lösungen oder aus einer Schmelze eines Seltenerdmetallsalzes in Ammoniumacetat wie z.B. dem Carbonat hergestellt, die bekannten Propionate dementsprechend aus propionsauren Lösungen. Die bekannten Benzoate sind hingegen meist aus einer Lösung der Säure mit dem Salz des jeweiligen Metalls oder in einer Benzoesäureschmelze erhalten worden.

Im Bereich der Seltenerdacetate $\text{SE}(\text{OAc})_3$ sind folgende Strukturtypen bekannt: der Sc-Typ ($\text{M} = \text{Sc}$) [2], der La-Typ ($\text{M} = \text{La, Ce}$) [3], der Pr-Typ ($\text{M} = \text{Pr}$) [4], der Ho-Typ

(M = Sm – Er und Y) und der Lu-Typ (M = Tm – Lu) [5], wobei jene des Neodyms und Promethiums bisher unbekannt sind. Die strukturellen Merkmale sind Raumnetze bei den Acetaten des La- und Pr-Typs mit den Koordinationszahlen 9 und 10 sowie Ketten bei den Acetaten des Sc-, Ho- und Lu-Typs mit Koordinationszahlen zwischen 8 und 6 (siehe Kapitel 4.1.1).

Die wasserhaltigen Acetate der Seltenerdmetalle sind ein bereits stark bearbeitetes Gebiet. Es sind Verbindungen der allgemeinen Zusammensetzung $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_x$ mit $x = 0,5; 1; 1,5; 2; 3; 4$ bekannt. Als Beispiele seien erwähnt: die Yttriumacetathydrate mit $x = 0,5; 2$ [8], die Praseodymacetathydrate mit $x = 1; 1,5$ [9,10], das Europiumhydroacetat mit $x = 3$ [9] und das Dysprosiumacetathydrat mit $x = 4$ [11]. Die strukturellen Merkmale der erwähnten Verbindungen werden durch den Wassergehalt geprägt. So liegen bei $x = 0,5; 1$ noch Ketten, bei $x = 1,5$ Schichten und bei $x > 2$ Dimere mit koordinierenden und bei $x > 1$ auch freien Wassermolekülen (siehe Kapitel 4.2.1) vor.

Von den essigsäurehaltigen Acetaten der Seltenerdmetalle sind hingegen nur wenige Strukturen bekannt. Dazu zählen jene der Verbindungen $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})$ mit $\text{SE} = \text{Nd, Sm} - \text{Gd, Ho}$ und $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})$ und $\text{SE} = \text{Y, Gd} - \text{Lu}$ [12]. Beide Verbindungstypen enthalten dimere Baueinheiten mit koordinierenden Säure- bzw. Wassermolekülen und neunfach koordinierten Metallatomen (siehe Kapitel 4.3.1).

Während der Bereich der Acetate stark erforscht ist, sind reine Propionate der Übergangsmetalle eher unbekannt. Das Zinkpropionat $\text{Zn}(\text{OPr})_2$ [16] bildet eine Netzstruktur mit vierfach koordinierten Zinkatomen. Die Propionathydrate $\text{Pr}(\text{OPr})_3(\text{H}_2\text{O})_3$ [12] und $[\text{Mn}(\text{OPr})_2(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})$ [17] bilden hingegen Kettenstrukturen mit Koordinationszahlen von 8 bei Mangan, 9 und 10 bei Praseodym (siehe Kapitel 4.4.1).

Das Gebiet der reinen Übergangsmetallbenzoate stellt eine nur geringfügig erforschte Stoffklasse dar. So sind bisher keine Benzoate der Seltenerdmetalle bekannt. Als reines Benzoat ist das Cobaltbenzoat $\text{Co}(\text{OBz})_2$ [18] zu erwähnen, das in einer Kettenstruktur aufgebaut ist und sechsfach koordinierte Cobaltatome beinhaltet (siehe Kapitel 4.5.1). Beispiele für Benzoate mit eingelagerten Säuremolekülen sind die Verbindungen $\text{M}_2(\text{OBz})_4(\text{HOBz})_2$ (M = Cr [22], Cu [23], Ru [24]) und $\text{Ru}_2(\text{OBz})_5(\text{HOBz})$ [24], die in beiden Fällen Kettenstrukturen enthalten (siehe Kapitel 4.6.1).

2 Allgemeine Arbeitsmethoden

Zur Untersuchung der strukturellen und physikalischen Eigenschaften der hergestellten Verbindungen wurden die im Folgenden beschriebenen Methoden verwendet. Röntgenographische Methoden sind sowohl am Einkristall, zur Strukturbestimmung, als auch am Pulver, zur Untersuchung der Phasenreinheit, durchgeführt worden. Die unterschiedlichen funktionellen Gruppen am jeweiligen Metallatom wurden zusätzlich mittels der IR- und Raman-Spektroskopie untersucht. In wenigen Fällen ist die elektronische Umgebung mittels Mößbauer- und Lumineszenzspektroskopie, sowie durch magnetische Messungen näher betrachtet worden. Auch das thermische Verhalten ausgewählter Verbindungen wurde mittels der Differenz-Scanning-Kalorimetrie gemessen. Des Weiteren sind als anwendungsorientierte Methoden zu nennen die Lumineszenzmessungen an bestimmten Europiumverbindungen sowie die Untersuchung von Nanopartikeln mittels eines Rasterelektronenmikroskops (REM) mit integrierter energiedispersiver Röntgenanalytik (EDX) zur Untersuchung der Elementverteilung auf der Partikeloberfläche. Im zweiten Teil des Kapitels wird auf die allgemeine, experimentelle Vorgehensweise unter Ausschluss von Sauerstoff im Detail eingegangen. Die angewendeten Apparaturen und die Computerprogramme zur Auswertung der unterschiedlichen Messergebnisse sowie die verwendeten Chemikalien werden am Ende des Kapitels tabelliert.

2.1 Physikalische Methoden

2.1.1 Röntgendiffraktometrie^[29]

2.1.1.1 Einkristallstrukturbestimmung

Kristalle weisen in allen drei Raumrichtungen Fernordnung auf. Zur Beschreibung des Kristalls genügt die Kenntnis des kleinsten, sich wiederholenden Bausteins (Elementarzelle). Sie wird durch die Gitterkonstanten a , b und c (die Beträge der Basisvektoren) und die drei zwischen den Basisvektoren aufgespannten Winkel α , β und γ charakterisiert. Zur

Beschreibung der Atomlagen werden die Atomparameter x, y, z verwendet, die Bruchteile der Gitterkonstanten sind. Die Gitterkonstanten werden als Einheiten benutzt, so dass die „absoluten“ Koordinaten für jedes Atom x_a, y_b, z_c lauten.

Die Wellenlänge von Röntgenstrahlung ist vergleichbar mit den Bindungslängen in Molekülen und den Abständen der Atome in Kristallen (Größenordnung 100 pm). Daher sind bei der Wechselwirkung eines Kristalls mit Röntgenstrahlung Interferenzerscheinungen zu erwarten. Die Beugung findet an den sogenannten Netzebenen statt, deren Orientierung im Kristall mit den Millerschen Indizes hkl beschrieben wird. Solch eine Ebene schneidet die Achsen der Elementarzelle (a -, b - und c -Achse) in den Achsenabschnitten $1/h, 1/k$ und $1/l$, wobei h, k und l ganze Zahlen sind. Der resultierende Reflex wird beobachtet, wenn die Braggsche Gleichung (1) erfüllt ist:

$$2d \cdot \sin \theta = n\lambda \quad (1)$$

mit d : Netzebenenabstand,

θ : Einfallswinkel der Strahlung,

n : Beugungsordnung ($n = 1, 2, 3 \dots$),

λ : Wellenlänge der Strahlung.

Röntgenstrahlung wird an der Elektronenhülle eines Atoms bzw. Ions gebeugt. Das Streuvermögen eines Atoms wird durch den Atomformfaktor f beschrieben, der vom Beugungswinkel θ abhängt. Je größer θ wird, desto kleiner wird der Atomformfaktor (bei $\theta = 0$ ist f gleich der Ordnungszahl des Atoms). Die Gesamtamplitude der an den (hkl) -Ebenen gebeugten Welle wird durch den Strukturfaktor wie folgt beschrieben:

$$F_{hkl} = \sum_i f_i e^{i\varphi_i} \quad (2)$$

$$\text{mit } \varphi_i = 2\pi(hx_i + ky_i + lz_i)$$

Die Intensität eines (hkl) -Reflexes ist proportional zu $|F_{hkl}|^2$. Der Strukturfaktor enthält die Information über die Elektronendichteverteilung in der Elementarzelle und ist sowohl von der Art der Atome als auch von deren Positionen abhängig. Das heißt, dass durch die Bestimmung der Reflexintensitäten die Elementarzelle rekonstruiert werden könnte. Aus den Intensitäten kann nur der Betrag des Strukturfaktors bestimmt werden, die Phaseninformation geht verloren (Phasenproblem). Bei zentrosymmetrischen Raumgruppen geht das

Phasenproblem in ein Vorzeichenproblem über, weil der Imaginärteil wegfällt, und kann daher mit großer Wahrscheinlichkeit richtig gelöst werden. Im Falle der nicht zentrosymmetrischen Elementarzelle ist der Strukturfaktor eine komplexe Zahl $|F_{hkl}|e^{i\Phi}$. Die resultierende Phase Φ kann zwischen 0° und 360° liegen. Bei der Strukturbestimmung durch Beugung von Röntgenstrahlung werden normalerweise zwischen 1000 und 50000 Reflexe gemessen. Da für jeden Reflex die verantwortliche Netzebene (hkl) im Kristall eine ganz bestimmte, räumliche Orientierung hat, muss der Kristall im Raum bewegt werden, um sie nach und nach in Reflexionsstellung zu bringen.

In der unter Hochvakuum stehenden Röntgenröhre wird ein fein fokussierter Elektronenstrahl durch eine angelegte Hochspannung von 30 - 60 kV von der Kathode aus auf die Anode gelenkt. Die Anode besteht aus einer ebenen Platte eines hochreinen Metalls, meist Molybdän oder Kupfer (Abb.1).

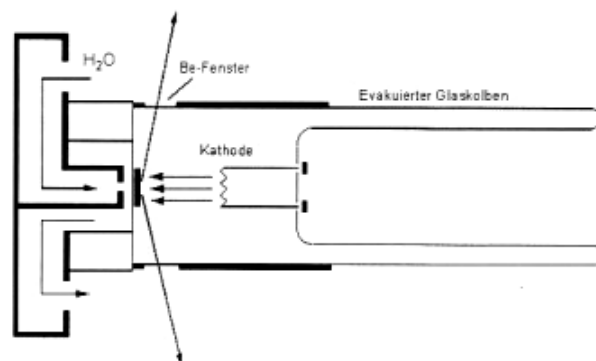


Abb. 1 : Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre.

In den obersten Schichten des Metalls der Anode wird durch verschiedene Prozesse Röntgenstrahlung freigesetzt. Bei der „charakteristischen Röntgenstrahlung“ wird Strahlung einer scharf definierten Wellenlänge emittiert. Zwar wird sie in alle Richtungen abgestrahlt, jedoch wird nur die seitlich aus den Beryllium-Fenstern austretende Röntgenstrahlung genutzt. Der Kristall wird auf einem Goniometerkopf befestigt und auf eine horizontale Drehachse mit Motorantrieb montiert. Die auftretenden Reflexe werden auf einer dahinter liegenden sog. „Image Plate“ festgehalten. Die runden Platten mit Durchmessern von 180 bis 350 mm sind mit einer Folie belegt, die mit Eu^{2+} dotiertes BaBrF enthält. Während der

Belichtung wird die Information auftreffender Röntgenquanten in Farbzentren gespeichert, die durch strahlungsinduzierte Oxidation von Eu^{2+} auf Eu^{3+} entstehen. Beim Auslesen mit einem Laserscanner wird die Rekombination der Farbzentren unter Rückbildung von Eu^{2+} ausgelöst, deren Intensität durch Photozellen für jeden Pixel gemessen wird.

Die im Weiteren beschriebenen Methoden liefern Lösungen für das Phasenproblem der Röntgenstrukturanalyse und geben Aufschluss über die Lage der Atome in der Elementarzelle.

Mit einer *Fouriersynthese* wird die Elektronendichtefunktion ρ durch die Einzelwellen $F_0(hkl)$ – auch Fourierkoeffizienten genannt – eines kohärenten Röntgenstrahls, deren Phasen bekannt sein müssen, mit Gleichung (3) berechnet:

$$\begin{aligned}\rho_{xyz} &= \frac{1}{V} \cdot \sum_{hkl} F_{hkl} \cdot e^{-i2\pi(hx+ky+lz)} \\ &= \frac{1}{V} \cdot \sum_{hkl} F_{hkl} \cdot [\cos(2\pi(hx+ky+lz)) + i \sin(2\pi(hx+ky+lz))]\end{aligned}\quad (3)$$

Diese Gleichung liefert für jeden Punkt (xyz) die zugehörige Elektronendichte in der Elementarzelle, aus deren Maxima sich dann die Koordinaten der Atome bestimmen lassen.

Mit einer *Differenz-Fouriersynthese* wird für jeden Reflex (hkl) von dem Ergebnis der Summation mit den beobachteten F_0 -Werten das Ergebnis einer analogen Summation mit den berechneten F_c -Werten abgezogen. Dadurch werden die entstehenden Abbrucheffekte bei der Summation über alle Reflexe (hkl), hervorgerufen durch den begrenzten Datensatz, weitgehend aufgehoben.

Bei der *Patterson-Methode* werden die F_0^2 -Werte verwendet, die keine Phaseninformation enthalten. Die zugehörige Pattersonfunktion ist wie folgt definiert:

$$P_{uvw} = \frac{1}{V^2} \cdot \sum_{hkl} F_{hkl}^2 \cdot [\cos(2\pi(hu+kv+lw)) + i \sin(2\pi(hu+kv+lw))]\quad (4)$$

Die Funktionsmaxima entsprechen den Endpunkten von Abstandsvektoren, woraus sich dann die Atomkoordinaten bestimmen lassen. Die Pattersonmethode wird vor allem für anorganische Substanzen mit nicht zu vielen Atomen in der Elementarzelle verwendet.

Unter den *direkten Methoden* versteht man die direkte Lösung des Phasenproblems, weil diese Methoden auf Zusammenhänge zwischen Intensitäten innerhalb einer Reflexgruppe und deren Phasen basieren. Nach Harker und Kasper lassen sich über die Symmetrieelemente Zusammenhänge zwischen den Strukturamplituden bestimmter Reflexpaare nachweisen, aus denen sich Ungleichungen ableiten zur Bestimmung der zugehörigen Phasen. Nach Sayre lässt sich der Strukturfaktor eines Reflexes hkl aus der Summe von Produkten der Strukturfaktoren aller Reflexpaare berechnen, deren Indices sich zu denen des gesuchten Reflexes addieren lassen.

$$F_{hkl} = k \cdot \sum_{h'k'l'} F_{h'k'l'} \cdot F_{h-h', k-k', l-l'} \quad (5)$$

Sayre geht davon aus, dass alle Produkte, bei denen mindestens ein Reflex schwach ist, kaum Beiträge liefern und sich mit gewisser Wahrscheinlichkeit gegenseitig aufheben.

Bei der Strukturlösung treten große Fehler in den Parametern auf, die in Unzulänglichkeiten der Lösungsmethoden, der Bestimmung von Elektronendichtemaxima aus Fouriersynthesen und natürlichen Fehlern im Datensatz begründet sind. Daher stimmen die für die einzelnen Reflexe hkl berechneten Strukturfaktoren F_c bzw. die Intensitäten F_c^2 mit den beobachteten Werten nicht genau überein. Es tritt ein Fehler Δ^1 bzw. Δ^2 auf:

$$\Delta^1 = \|F_o - F_c\| \quad \text{und} \quad \Delta^2 = |F_o^2 - F_c^2| \quad (6)$$

Eine häufig verwendete Methode der Strukturverfeinerung ist die *Methode der kleinsten Fehlerquadrate*. Dabei lassen sich die Parameterverschiebungen, die das Strukturmodell verbessern, wie folgt berechnen (7):

$$\sigma(p_i) = \sqrt{\frac{b_{ij}(\sum \omega \Delta^2)}{m - n}} \quad (7)$$

mit m : Zahl der Parameter,

n : Zahl der verfeinerten Parameter,

b_{ij} : Diagonalelemente der inversen Matrix A^{-1} ,

ω : Faktor.

Wegen der groben Vereinfachung auf eine lineare Abhängigkeit entspricht das Resultat jedoch nicht einer mathematisch exakten Lösung. Man wiederholt den Vorgang in mehreren Zyklen so oft, bis die Veränderungen der Atomparameter Δp_i klein gegenüber ihren Standardabweichungen sind (normalerweise weniger als 1 %), bis die Verfeinerung „konvergiert“.

Um beurteilen zu können, wie gut ein Strukturmodell mit der „Wirklichkeit“ übereinstimmt, berechnet man sogenannte Zuverlässigkeitsfaktoren oder R-Werte.

$$R = \frac{\sum_{hkl} \Delta_1}{\sum_{hkl} |F_0|} = \frac{\sum_{hkl} ||F_0| - |F_c||}{\sum_{hkl} |F_0|} \quad (8)$$

Dieser R-Wert ergibt mit 100 multipliziert die mittlere, prozentuale Abweichung zwischen beobachteten und berechneten Strukturamplituden.

Beim gewogenen R-Wert ωR gehen bei der Verfeinerung direkt die minimalisierten Fehlerquadratsummen ein. Er unterscheidet sich je nachdem, ob gegen F_0 - oder F_0^2 -Daten verfeinert wurde:

$$\omega R = \sqrt{\frac{\sum_{hkl} \omega \Delta_1^2}{\sum_{hkl} \omega F_0^2}} \quad (9)$$

$$\omega R_2 = \sqrt{\frac{\sum_{hkl} \omega \Delta_2^2}{\sum_{hkl} \omega (F_0^2)^2}} = \sqrt{\frac{\sum_{hkl} \omega (F_0^2 - F_c^2)^2}{\sum_{hkl} \omega (F_0^2)^2}} \quad (10)$$

Ein anderes Qualitätsmerkmal für das Strukturmodell ist der Gütefaktor S (Goodness of fit):

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{hkl} \omega \Delta^2}{m - n}} \quad (11)$$

mit m : Zahl der Reflexe,
n : Zahl der Parameter.

Der Gütefaktor S sollte bei richtiger Struktur einen Wert um 1 annehmen.

2.1.1.2 Pulverdiffraktometrie^[30]

Bei der röntgenographischen Untersuchung am Pulver geht die dreidimensionale Ordnung der Beugungsreflexe verloren. Ein auf die Probe treffender monochromatischer Röntgenstrahl wird an allen möglichen Netzebenenscharen gebeugt, wobei Reflexe mit dem gleichen Beugungswinkel zusammenfallen. Im Unterschied zum Einkristall erhält man hier keine scharfen Röntgenreflexe, sondern breite Reflexe der einzelnen Kristallite mit willkürlicher Orientierung. Eine Pulverisierung der Probe gewährleistet, dass jede Kristallorientierung in der Probe mit gleicher Häufigkeit vorkommt. Im Pulverdiagramm werden dann die Intensitäten der einzelnen Reflexgruppen gegen den zugehörigen Beugungswinkel dargestellt (Abb.2).

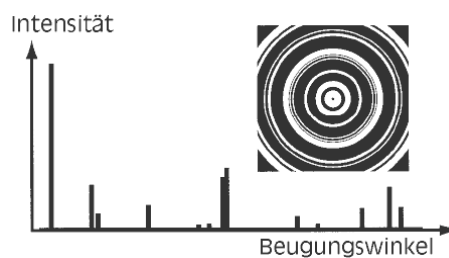


Abb. 2 : Pulverdiagramm mit radialer Intensitätsverteilung.

Das Messprinzip der Pulverdiffraktometrie beruht z.B. auf dem Debye-Scherrer-Verfahren. Die Probe wird in ein dünnes Markröhrchen gefüllt und mittels eines Goniometerkopfes zentral zwischen Röntgenquelle und Detektor positioniert. Die Probe wird bei der Messung stetig gedreht, wobei der Detektor sich gleichzeitig um die Probe bewegt und kontinuierlich die Intensität der abgebeugten Röntgenstrahlung als Funktion des Beugungswinkels aufzeichnet. Als Röntgenquelle wird üblicherweise Cu-K $_{\alpha}$ -Strahlung ($\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$) verwendet.

2.1.2 Spektroskopie^[30, 31, 32]

2.1.2.1 Infrarot- und Raman-Spektroskopie

Die Schwingungsspektroskopie ist eine wichtige Methode zur Identifizierung und zur Strukturaufklärung chemischer Verbindungen. Da ein Molekül oder ein Ion in einer kristallinen Substanz verschiedene Orientierungen statistisch einnimmt und bei der kristallographischen Strukturbestimmung nur die statistisch gemittelte Struktur erhalten werden kann, kann das Schwingungsspektrum die wahre Molekülstruktur beschreiben. Bei der Schwingungsspektroskopie werden die Frequenzen ermittelt, mit welchen Atome relativ zueinander schwingen. Diese liegen in realen Molekülen im Bereich von 10^{12} und $3 \cdot 10^{14}$ Hz und somit im Bereich der Frequenzen von Infrarotstrahlung.

Bei der Infrarot-Spektroskopie wird die Probe mit infrarotem Licht bestrahlt und die Lichtabsorption als Funktion der Wellenzahl gemessen. Bei der Raman-Spektroskopie wird die Probe mit monochromatischem, sichtbarem Licht bestrahlt und die Intensität des von der Probe gestreuten Lichtes als Funktion von der Wellenzahl gemessen. Die Wellenlänge bzw. Wellenzahl ergibt sich aus der Energie E der Strahlung nach dem Gesetz von Einstein zu:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = hc\tilde{\nu} \quad \text{mit } c = \lambda\nu \quad (12)$$

mit $\tilde{\nu} = 1/\lambda$: Wellenzahl (cm^{-1}).

Die Intensität eines Lichtstrahls nimmt nach dem Lambert-Beerschen Gesetz auf dem Weg durch eine Probe exponentiell ab:

$$\lg \frac{I}{I_0} = -\epsilon[J]l \quad (13)$$

mit I_0 : Intensität der einfallenden Strahlung einer bestimmten Wellenzahl,

I : Intensität der ausgehenden Strahlung,

l : Wegstrecke, die die Strahlung zurückgelegt hat,

$[J]$: die Konzentration des absorbierenden Teilchens J ,

ϵ : molarer Absorptionskoeffizient (hängt von der Frequenz der einfallenden Strahlung ab).

Das Verhältnis I/I_0 bezeichnet man auch als die Durchlässigkeit T der Probe. Bei der Interpretation des Spektrums werden für verschiedene in Betracht zu ziehende Strukturen die zugehörigen Spektren überlegt und diese Erwartungsspektren mit dem beobachteten Spektrum verglichen.

Die Schwingungen, die von allen anderen Schwingungen des Moleküls entkoppelt sind, nennt man **Normalschwingungen** (oder auch Normalmoden) des Moleküls. Die Schwingungen sind entkoppelt, wenn jede Schwingung unabhängig von der anderen angeregt werden kann. In Abb. 3 sind sämtliche Normalschwingungen einer CH_2 -Einheit dargestellt.

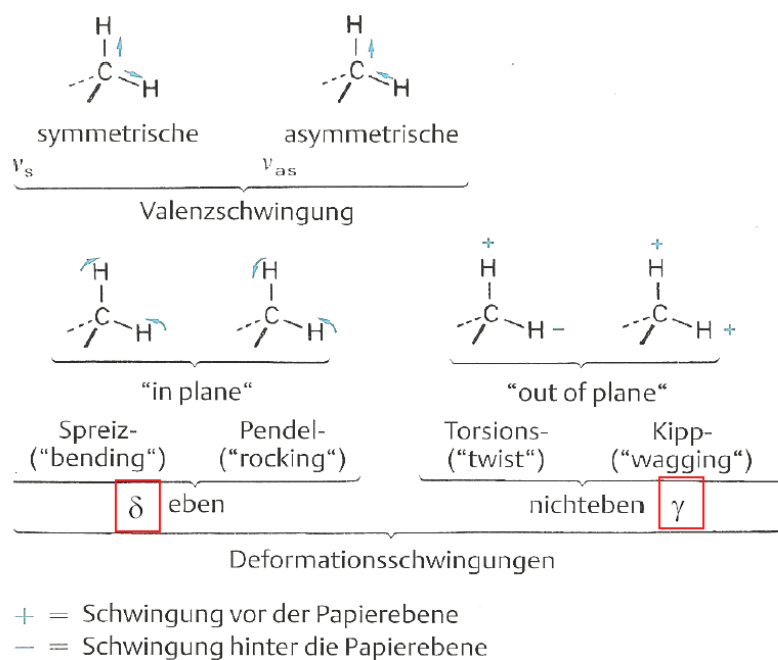


Abb. 3 : Normalschwingungen einer CH_2 -Einheit [31].

In den meisten Fällen besitzen Deformationsschwingungen (allgemein Schwingungen, die nicht durch Veränderungen von Bindungslängen zustande kommen) kleinere Frequenzen als Valenzschwingungen. Schwere Atome sind träger und schwingen daher langsamer als leichte Atome.

Molekülspektren unterliegen bestimmten Auswahlregeln, deren genaue Form von der Art des Übergangszustandes abhängt. Das Quadrat des Übergangsdipolmoments steht in der folgenden Beziehung zu der dimensionslosen Oszillatorstärke f :

$$f = \frac{4\pi m_e \nu_{EA}}{3e^2 \hbar} \cdot |\mu_{EA}|^2 \quad (14)$$

Die Oszillatorstärke stellt damit ein Bindeglied dar zwischen makroskopisch messbarer und mikroskopisch berechenbarer Intensität, die auf diesem Wege vergleichbar werden.

Man kann nur dann einen Übergang im Spektrum beobachten, wenn das Übergangsdipolmoment von Null verschieden ist. Unter dieser Bedingung bestimmt man die Auswahlregel. Für die IR-Spektroskopie gilt die Auswahlregel, dass jede Bewegung eines Moleküls, die mit einer Änderung des Dipolmoments einhergeht, zur Emission/Absorption elektromagnetischer Strahlung führt. Für die Raman-Spektroskopie gilt, dass die Schwingungsübergänge mit einer Änderung der Polarisierbarkeit verbunden sein müssen.

Gängige IR-Spektrometer erfassen einen Wellenzahlenbereich von 200 bis 4000 cm^{-1} , in denen Schwingungen eher leichter Atome gemessen werden. Als Strahlenquelle wird meist der Nernst-Stift, der aus einem Mischoxid von ThO_2 , ZrO_2 und Y_2O_3 besteht, verwendet. Die zu messende feste Probe muss fein und gleichmäßig verteilt in eine dünne Schicht gebracht werden. Lichtreflexion an der Oberfläche wird unterdrückt, indem die pulverisierte Substanz in einen unter Druck fließenden Feststoff eingebettet wird, vorzugsweise KBr. Für den Messbereich niedriger Frequenzen verwendet man Polyethylen, das in diesem Bereich nahezu transparent ist.

Bei dem Raman-Spektrometer wird in einem ähnlichen Wellenzahlenbereich gemessen. Als ideale Lichtquelle dienen Gaslaser, die ein monochromatisches, polarisiertes Licht von hoher Intensität kontinuierlich abgeben können. Weitere mögliche Lichtquellen sind Farbstoff- und Feststofflaser.

2.1.2.2 Mößbauerspektroskopie

Die Mößbauerspektroskopie verwendet elektromagnetische Strahlung mit Quantenenergien im keV-Bereich, also γ -Strahlung. Im Prinzip wird die von einem bestimmten Isotop beim Übergang von einem angeregten Zustand in den Grundzustand emittierte Strahlung einer wohldefinierten Energie von Kernen desselben Isotops absorbiert, um diese vom Grundzustand in den betreffenden angeregten Zustand zu überführen (Resonanzabsorption).

Diese Methode ist nur im Festkörper möglich, weil dann der entstehende Rückstoßimpuls des Korns, bei der Absorption eines γ -Quants, auf den gesamten Festkörper übertragen wird. Die entstehende Rückstoßenergie ist somit kleiner als die Linienbreite. Zusätzlich kann im Festkörper eine Energieübertragung an das Gitter eintreten und zu einem Energieverlust oder –gewinn führen. Nur die ohne Energieübertragung an das Gitter emittierte und absorbierte Strahlung kann genutzt werden. Der Lamb-Mößbauer- bzw. Debye-Waller-Faktor f beschreibt den Anteil an Quanten, die ohne Energieverlust emittiert oder absorbiert werden.

$$f = e^{-k^2 \langle x^2 \rangle} \quad (15)$$

mit $k = \frac{E}{\hbar \cdot c}$: Wellenzahl des γ -Quants

$\langle x^2 \rangle$: mittleres Auslenkungsquadrat des Mössbauer-atoms aus seiner Ruhelage

Aufgrund der Energieabhängigkeit muss die Probe bei höheren γ -Energien zur Verringerung von $\langle x^2 \rangle$ zusätzlich gekühlt werden.

Bei der Messung werden Quelle und Absorber relativ zueinander bewegt und die in den Detektor fallende γ -Strahlung als Funktion der Geschwindigkeit bestimmt. Von Interesse sind mögliche Hyperfeinwechselwirkungen zwischen Elektronenhülle und Atomkern, die zu einer Aufspaltung und Verschiebung der Energiezustände des Korns und damit der optischen Spektrallinien führen. Es existieren drei Arten von Hyperfeinwechselwirkungen:

- Magnetische Wechselwirkung: Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten des Atomkerns im Grundzustand und angeregten Zustand mit einem von den umgebenen Elektronen erzeugten Magnetfeld.
- Elektrische Quadrupolwechselwirkung: Wechselwirkung zwischen dem elektrischen Quadrupolmoment des Kerns und dem von den Elektronen erzeugten elektrischen Feldgradienten. Aufgrund der von der Kugelsymmetrie abweichenden Verteilung der Elektronenladungen in der Umgebung des Kerns besitzen verschiedene Orientierungen des Kerns unterschiedliche Energien.
- Isomerieverschiebung: Verschiebung aufgrund von elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen Kern- und Elektronenladung. Diese ist von der Gesamtenergie des Kerns abhängig und somit auch von dessen Größe.

2.1.2.3 Lumineszenzspektroskopie

Bei der Lumineszenzspektroskopie wird die nach Energieabsorption angeregte Emission von Strahlung einer Probe untersucht. Solche Farbstoffe werden Phosphore genannt. Die Emission mancher Phosphore kann zunächst gespeichert und erst nach Stimulation mit z.B. Wärme angeregt werden. Unter dem Vorgang des Quenchens versteht man den umgekehrten Fall, dass durch Abkühlen die Emission unterbunden wird.

Die Lumineszenzfähigkeit im anorganischen Festkörper wird geprägt durch den Einbau von Fremdionen in ein Kristallgitter, die die Zentren der Lichtemission darstellen. Diese Fremdionen sind meist Ionen der Schwermetalle und Seltenerdmetalle.

Als Verwendungsmöglichkeiten soll ihre Anwendung als Festkörperlaser, im Bereich der Lichttechnik ihre Anwendung als Leuchtstofflampen und in der Röntgentechnologie als Speicherzentren in Röntgenfolien u.a. genannt werden.

Beim eigentlichen Vorgang der Lumineszenz wird durch die Absorption ein Elektron vom Grundzustand in einen angeregten Zustand überführt. Unter Relaxation in Form von Gitterschwingungen erreicht das Leuchtzentrum aus dem angeregten Schwingungszustand die Gleichgewichtslage des angeregten Niveaus. Beim Übergang in den angeregten

Schwingungszustand des Grundniveaus erfolgt die Emission. Durch weitere Gitterrelaxationen wird dann die Gleichgewichtslage des Grundzustands erreicht.

2.1.3 Thermoanalyse^[33, 34]

Die thermische Analyse beinhaltet Methoden, bei denen physikalische und chemische Eigenschaften einer Substanz, eines Substanzgemisches und/oder von Reaktionsgemischen als Funktion der Temperatur oder der Zeit gemessen werden. Das Messergebnis eines einzelnen thermoanalytischen Verfahrens hat ohne weitere Kenntnisse über die Probe und ihre Umwandlungen einen relativ geringen Aussagewert. Zusätzliche Kenntnisse können der Thermodynamik, der Reaktionskinetik, gleichartigen Messungen an Referenzproben mit bekannten Eigenschaften oder andersartigen Untersuchungen entstammen. Oft ist es sinnvoll, mehrere thermoanalytische Methoden gleichzeitig an derselben Probe anzuwenden.

Bei der Thermogravimetrie (TG) wird die Gewichtsänderung der Probe während des vorgegebenen Temperatur-Zeit-Programms in einer möglichst definierten Atmosphäre gemessen. Sie wird hauptsächlich zur Bestimmung der einzelnen Komponenten und im Allgemeinen zur Ermittlung der Reaktionskinetik von Festkörperreaktionen verwendet.

Bei der Messung wird die Probe einem kontrollierten Temperaturprogramm unterworfen, wobei die Temperatur kontinuierlich, quasi-isotherm oder isotherm verändert werden kann. Der Probenhalter im Ofen steht mit einer automatisch kompensierenden Waage in Verbindung, so dass das Gewicht der Probe in Abhängigkeit von der Temperatur kontinuierlich gemessen werden kann. Die Atmosphäre im Probenraum ist gewöhnlich ein inertes Gas, das die Probe laminar umströmt und die bei einer Massenänderung von der Probe abgegebenen Reaktionsprodukte vor Eintreten einer Rückreaktion entfernt. Mittels Massenspektrometrie können die entweichenden Produkte identifiziert werden.

Die Differenzthermoanalyse ist die älteste Messanordnung der Thermoanalytik. Sie wurde von Le Chatelier (1887) und von Roberts-Austin (1889) erfunden. Bei der Differenzthermoanalyse wird die Temperaturdifferenz ΔT zwischen der Probe und einer Vergleichsprobe in Abhängigkeit von der Temperatur gemessen, wobei Probe und Referenz

gemeinsam in einem Ofen aufgeheizt werden. Die bei einer Reaktion freigesetzte oder verbrauchte Wärme bewirkt eine Änderung des Wärmestroms zwischen Ofen und Probe. Als Bezugstemperatur für die Temperaturdifferenz können dienen die Ofentemperatur, die Temperatur der Probe, der Vergleichsprobe, eines Probenbehälters oder einer Messstelle in Probennähe. Am genauesten wäre die Proben temperatur, doch sie ist bei einer Reaktion im Allgemeinen inhomogen. Am häufigsten wird die Temperatur der Referenzprobe gewählt, die im Idealfall der Proben temperatur gleich oder mit einer konstanten Abweichung behaftet ist.

Bei der Methode der Differenz–Scanning–Kalorimetrie (DSC) wird die Differenz der Energiezufuhr zu einer Substanz und einem Referenzmaterial als Funktion der Temperatur gemessen, während die Substanz und das Referenzmaterial einem geregelten Temperatur-Programm unterworfen werden.

2.1.4 Rasterelektronenmikroskopie^[35]

Das Rasterelektronenmikroskop (REM) (englisch „Scanning Electron Microscope“ (SEM)) basiert auf der Abrasterung der Objektoberfläche mittels eines feingebündelten Elektronenstrahls. Die erzeugten Bilder weisen eine hohe Tiefenschärfe auf. Der maximale theoretische Vergrößerungsfaktor ist 1.000.000 : 1. Der Vorgang wird im Hochvakuum durchgeführt, um Wechselwirkungen mit Atomen und Molekülen der Luft zu vermeiden. Die Elektronen werden an der sogenannten Glühkathode, bestehend z.B. aus einem Wolframdraht oder einem Lanthanhexaborid-Kristall, durch Erhitzen emittiert und mittels eines hohen elektrischen Feldes beschleunigt. Bei dem eigentlichen Rasterprozess wird der Primärelektronenstrahl zeilenweise über die Oberfläche des Objekts geführt und das Bild erzeugt.

Aufschluss über die eigentliche Topographie der Oberfläche erhält man durch das Detektieren der Sekundärelektronen, die durch Wechselwirkungen zwischen den Primärelektronen des Strahls und den Atomen der Probenoberfläche erzeugt werden und die niedrige Energien aufweisen. Ein weiteres Verfahren bestimmt die Topographie über die Detektion der zurückgestreuten Elektronen mit hoher Energie. Die Intensität des Signals ist abhängig vom Gewicht der in der Probe enthaltenen Elemente. Dadurch erscheinen Bereiche

heller, in denen schwerere Elemente enthalten sind, aufgrund der stärkeren Rückstreuung. Die Interpretation von Kontrastbildern wird stark beeinflusst durch die Probenbeschaffenheit und die dadurch entstehenden Ungenauigkeiten im gemessenen Bild. Als unerwünschte Kontrastmechanismen sind zu nennen der Flächenneigungs-, der Kanten-, der Abschattungs- und der Aufladungskontrast. Das Ausmaß dieser Wechselwirkungen hängt stark von der Beschleunigungsspannung und vom Objektmaterial ab.

2.1.5 Energiedispersive Röntgenanalytik^[36]

Das EDX-Verfahren (Energy-Dispersive X-Ray) dient zur Elementanalyse der oberflächennahen Bereiche von Festkörpern. Die zu untersuchende Probe wird mit energiereichen Primärelektronen bestrahlt, wodurch Elektronen aus kernnahen Schalen der Probenatome herausgestoßen werden. Die entstandenen Lücken werden von Elektronen aus weiter vom Atomkern entfernt liegenden Elektronenschalen aufgefüllt. Die Energiedifferenz zwischen den beiden beteiligten Elektronenschalen kann auch als Röntgenstrahlung emittiert werden und ist für jedes Element charakteristisch. Aus dem erhaltenen Röntgenspektrum kann die Elementzusammensetzung der Probe identifiziert und über die Intensität der Spektrallinien quantifiziert werden. In Kombination mit einem Rasterelektronenmikroskop (REM) kann zusätzlich die Elementverteilung auf der Probenoberfläche mit hoher Ortsauflösung abgebildet werden.

2.1.6 Magnetismus^[37]

Bei der magnetischen Messung einer Probe wird die Wechselwirkung zwischen einem angelegten, äußeren Magnetfeld und dem magnetischen Moment der Probe in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Durch das äußere Magnetfeld H wird eine Änderung der Feldstärke des Magnetfeldes in der Probe induziert, die von der Intensität der Magnetisierung M abhängig ist. Dieser Zusammenhang wird durch die Volumenssuszeptibilität χ oder molare magnetische Suszeptibilität χ_m beschrieben.

$$\chi = \frac{M}{H} \quad (16)$$

Die Intensität der Magnetisierung entspricht der Änderung der inneren Energie des Körpers im magnetischen Feld.

$$M = -\frac{\partial E}{\partial H} \quad (17)$$

Der Magnetismus eines Festkörpers setzt sich zusammen aus den magnetischen Momenten der darin enthaltenen Atome und Ionen. Das magnetische Moment eines Atoms beinhaltet größtenteils den Beitrag der Elektronenhülle (Hüllenmoment), zu dem das Bahnmoment, das mit dem Bahndrehimpuls der Elektronen verknüpft ist, und das Spinmoment der Elektronen beitragen. Das äußere Magnetfeld induziert durch die Bewegung der Elektronen in der Probe ein magnetisches Moment, das dem angelegten Feld entgegengesetzt gerichtet ist. Dieser diamagnetische Effekt beruht auf den gepaarten Elektronen und ist somit eine universelle Eigenschaft der Materie. Wenn in der Probe ausschließlich gepaarte Elektronen enthalten sind, dominiert dieser Effekt und man spricht von Diamagnetismus. Die Magnetisierung ist negativ und die Suszeptibilität liegt im Bereich von -1 bis $100 \cdot 10^{-6}$ emu/mol. Die Magnetisierung ist unabhängig von der Feldstärke und der Temperatur.

Spin- und Bahndrehimpuls von ungepaarten Elektronen verursachen ein permanentes magnetisches Moment, das sich in Richtung des angelegten Magnetfeldes ausrichtet. Man spricht von Paramagnetismus, dessen Suszeptibilität zwischen 100 und $100.000 \cdot 10^{-6}$ emu/mol liegt. Der paramagnetische Effekt ist viel stärker als der diamagnetische und wird nur in Gegenwart eines äußeren Feldes beobachtet. Der diamagnetische Anteil der Suszeptibilität kann z.B. mit Hilfe von Pascal-Konstanten abgeschätzt werden und muss um diesen Wert korrigiert werden.

$$\chi_{\text{dia}} = \frac{\sum_i \chi_{\text{Ai}}}{\sum_i \chi_{\text{Bi}}} \quad (18)$$

mit A_i : Beitrag der Atome i

B_i : Beitrag der Bindungen i

Im Gegensatz zum Diamagnetismus ist die zugehörige Magnetisierung temperaturabhängig, da bei höheren Temperaturen eine konkurrierende Wechselwirkung zwischen der ausrichtenden Wirkung des Feldes und der auf statistische Gleichverteilung hinwirkenden thermischen Bewegung auftritt. Die paramagnetische Suszeptibilität nimmt daher zu höheren Temperaturen ab.

Das Curiesche Gesetz (1895) besagt, dass die paramagnetische Suszeptibilität umgekehrt proportional zur absoluten Temperatur ist.

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (19)$$

Dieses Gesetz gilt für paramagnetische Substanzen, deren Zentren durch diamagnetische Atome getrennt werden. Tritt jedoch magnetischer Austausch über Kopplung ungepaarter Spins benachbarter Atome auf, so folgt die Temperaturabhängigkeit dem Curie-Weiss-Gesetz.

$$\chi = \frac{C}{T - \Theta} \quad (20)$$

In magnetisch konzentrierten, paramagnetischen Proben, können verschiedene magnetische, kollektive Wechselwirkungen beobachtet werden. Die drei wichtigsten Interaktionen sind der Ferro-, der Antiferro- und der Ferrimagnetismus. Beim Ferromagnetismus tritt eine spontane Parallelstellung benachbarter magnetischer Dipole unterhalb der Curie-Temperatur T_C ein. Oberhalb von T_C gilt das Curie-Weiss-Gesetz mit negativer Weiss-Konstante Θ . Unterhalb von T_C ist die Suszeptibilität stark feldabhängig, wobei häufig Hystereseschleifen beobachtet werden. Beim Antiferromagnetismus gilt der umgekehrte Fall; benachbarte magnetische Dipole richten sich unterhalb der Néel-Temperatur T_N spontan antiparallel aus. Oberhalb von T_N gilt das Curie-Weiss-Gesetz mit positiver Weiss-Konstante Θ . Unterhalb von T_N ist die Suszeptibilität nur leicht feldabhängig. Beim Ferrimagnetismus tritt eine spontane antiparallele Ausrichtung benachbarter magnetischer Dipole unterschiedlicher Größe unterhalb von T_C ein.

Bei Metallkomplexen ist zu beobachten, dass der Beitrag des Bahnmoments abnimmt oder sogar verschwindet, da die beteiligten Metallorbitale an Entartung verlieren und so die Bewegung des Elektrons durch die sterischen Ansprüche gehemmt wird. Die Austauschwechselwirkung kann über die besetzten Orbitale von intermediären diamagnetischen Brückenatomen stattfinden. Bei einem Superaustausch treten die spintragenden Zentren über ihre magnetischen Orbitale (Orbitale mit einem ungepaarten Elektron) direkt in Wechselwirkung. Dabei spielt der Abstand zwischen den Zentren eine große Rolle, da bei großem Abstand die Überlappungsdichte der beteiligten Orbitale gleich Null ist und keine Wechselwirkung stattfinden kann. Sind die magnetischen Orbitale orthogonal zueinander, ist das Überlappungsintegral S gleich Null und ferromagnetische Wechselwirkungen werden beobachtet. Im Fall nicht-orthogonaler Orbitale hat das Überlappungsintegral einen von Null verschiedenen Wert und antiferromagnetische Wechselwirkungen werden beobachtet.

2.2 Chemische Arbeitsmethoden

2.2.1 Allgemeine Synthese

In diesem Kapitel wird die allgemeine Vorgehensweise bei der Herstellung neuer Carboxylate durch die Oxidation des Metalls mit der jeweiligen Liebig-Säure beschrieben. Der Synthesevorgang wird geprägt durch das Arbeiten unter inerten Bedingungen aufgrund der hohen Oxophilie der Metalle und der Hydrophilie der Säuren.

Als Reaktionsgefäß werden Duranglasampullen verwendet. Duranglas eignet sich aufgrund des milden Temperaturbereichs von 130 bis 250 °C, in dem die Umsetzungen durchgeführt werden, sehr gut. Zunächst wird ein 1 ½ m langes Glasrohr mit einem Glasschneider geviertelt. Die Enden der Glasstücke werden mit einem Erdgas-Sauerstoff-Brenner abgerundet. Im nächsten Schritt werden die Glasrohre mittig zu zwei Ampullen durchgeschmolzen, wobei ein langsames Verjüngen und anschließendes Tempern zum Herstellen stabiler Böden ratsam ist. Die Ampullen werden mindestens einen Tag bei 100°C in einem Trockenschrank gelagert, bevor sie dann zu 10 cm langen Ampullen verjüngt werden. Auch bei der Verjüngung ist zu beachten, dass man durch langsames, mildes Heizen instabile, dünne Wände vermeidet.

Die fertigen Glasampullen werden bis zum Zeitpunkt ihrer Verwendung im Trockenschrank aufbewahrt, um Restfeuchtigkeit auf und in der Glasampulle zu beseitigen. Dies gilt auch für sämtlichen Laborbedarf wie z.B. Wägeschiffchen und Spatel, der zum Umfüllen der Edukte benötigt wird. Damit wird vermieden, dass Feuchtigkeit in die trockene Gasatmosphäre (Argon) der Handschuhbox gelangt.

Die Handschuhbox verfügt über zwei unterschiedlich große Schleusen, die separat evakuiert und mit Argongas geflutet werden können, um alle benötigten Geräte hinein und nach verrichteter Arbeit wieder herauszunehmen (Abb. 4).



Abb. 4 : Handschuhbox der Firma BRAUN.

Über eine digitale Anzeige können der momentane Druck, der Wasser- und Sauerstoffgehalt in der Handschuhbox und weitere Funktionen abgerufen werden.

Um die gefüllten Glasampullen unter Argonatmosphäre aus der Handschuhbox entnehmen zu können, verwendet man eine spezielle Glasapparatur, den Quickfit (Abb. 5). Die Glasampulle ist dabei durch einen Gummiring im Drehverschluss und durch die geschlossenen Seitenhähne nach außen hin abgedichtet.



Abb. 5 : Quickfit mit Duranglasampulle.

Die Glasampulle wird anschließend über den Seitenhahn des Quickfits an eine Vakuumlinie angebracht und evakuiert. Als Vakuumlinie bezeichnet man eine Glasapparatur, die über mehrere Seitenhähne verfügt und an eine Vakuumpumpe angeschlossen ist (Abb. 6).



Abb. 6 : Vakuumlinie mit befestigtem Quickfit.

Die Glasampulle wird im evakuierten Zustand an der verjüngten Stelle abgeschmolzen, wenn es sich um die Umsetzung mit einer festen Säure handelt. Bei einer flüssigen Säure würde das Evakuieren zu Verlusten führen. Diese Säuren werden daher erst an der Vakuumlinie eingebracht, indem zusätzlich eine Argongastrockenanlage mit Gaszufuhr an diese Apparatur

angeschlossen wird. Die Trockenanlage ist mit einer Argongas-Druckflasche verbunden und besteht aus mehreren Glastürmen mit unterschiedlichen Trockenmitteln wie z.B. Silicagel oder Kaliumhydroxid. Mittels einer Spritze mit langer Kanüle kann im Argongasgegenstrom die Säure über die Verjüngung hinweg dem Metall hinzugefügt werden. Das Gemisch wird anschließend von außen über ein Dewargefäß mit flüssigem Stickstoff eingefroren, und es wird evakuiert. Nach anfänglichem Auftauen wird erneut eingefroren und der Vorgang des Abschmelzens eingeleitet. Die Umsetzung findet dann in einem Trockenschrank unter dem jeweiligen, vorgegebenen Temperaturprogramm statt.

Die bei der Umsetzung entstandenen Kristalle werden unter einem Polarisationsmikroskop auf ihre Güte hin geprüft und mittels eines Glasfadens in ein Markröhrchen der entsprechenden Größe überführt. Da es sich meist um luftempfindliche, kristalline Verbindungen handelt, erfolgt die gesamte Prozedur in der Handschuhbox. Das Markröhrchen wird anschließend auf einem Goniometerkopf befestigt und der Kristall auf dem Diffraktometer für die Messung justiert.

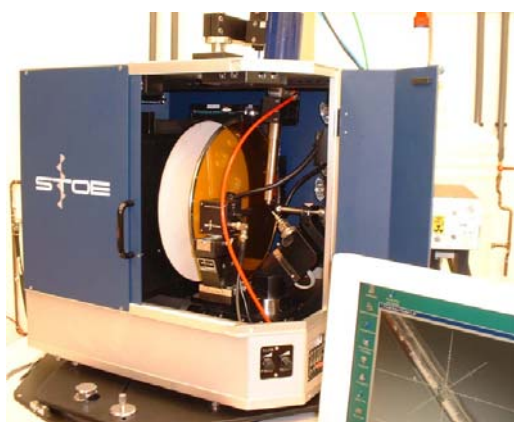


Abb. 7 : Röntgendiffraktometer, IPDS II (Image Plate Diffraction System).

Aus den röntgenographischen Messdaten wird die Raumgruppe der jeweiligen Verbindung anhand systematischer Auslöschungen bestimmt. Die Strukturlösung erfolgt mit den Programmen SIR-92 [38] und *SHELXS-97* [39] unter Benutzung der graphischen Oberfläche *X-STEP 32*. Die Verfeinerung der Struktur wird mit *SHELXL-97* [39] durchgeführt. Die

abschließenden Absorptionskorrekturen und Kristallgestaltoptimierung wurden mit den Programmen *X-RED* bzw. *X-SHAPE* [40] erstellt. Die Kristallstrukturen wurden mit dem Programm *Diamond 3* „visualisiert“.

2.2.2 Verzeichnisse

2.2.2.1 Geräteverzeichnis

Gerätebeschreibung	Hersteller
Diffraktometer	
Pulver-, $\theta/2\theta$ STADI P	Stoe & Cie, Darmstadt /D
Imaging-Plate-System-, IPDS I	Stoe & Cie, Darmstadt /D
Imaging-Plate-System-, IPDS II	Stoe & Cie, Darmstadt /D
Spektrometer	
Infrarot-, IFS 66v/S	Fa. Bruker, Rheinstetten /D
Mössbauer-,	Lehrstuhl Prof. Felser, Uni Mainz
Lumineszenz-,	Horiba Jobin Yvon GmbH, München
Differenz-Thermo-Analyse, TA1	Mettler-Instrumente AG, Schweiz
Elektronendispersive Analytik, DCL7668	Oxford Instruments
Rasterelektronenmikroskop, SUPRA 40VP	Zeiss, Oberkochen
Magnetometer	Quantum Design, San Diego, USA

2.2.2.2 Chemikalienverzeichnis

Chemikalie	Hersteller
Metalle	
Mangan (98-99%)	Merck
Eisen (99,5%)	Merck
Cobalt (98-99%)	Merck
Praseodym (99,9%)	Alfa
Neodym (99,9%)	Alfa
Samarium (99,9%)	ABCR
Europium (99,9%)	Alfa
Gadolinium (99,9%)	ChemPur
Dysprosium (99,9%)	ChemPur
Holmium (99,9%)	ChemPur
Erbium (99,9%)	ChemPur
Thulium (99,9%)	ChemPur
Ytterbium (99,9%)	STREM
Säuren	
Essigsäure (99%)	Höchst
Propionsäure (99%)	Riedel-de Häen
Malonsäure	Riedel-de Häen
Benzoessäure (99,5%)	Riedel-de Häen
Salicylsäure (99,5%)	Merck

2.2.2.3 Programmeverzeichnis

Programm	Verwendung
SIR-92, SHELXS-97	Kristallstrukturlösung
SHELXL-97	Kristallstrukturverfeinerung
X-RED, X-SHAPE	Kristallgestaltoptimierung bei numerischer Absorptionskorrektur
STOE Win XPOW	Auswertung und Indizierung von Pulverdiffraktogrammen
PLATON 32	Überprüfung der Kristallstrukturlösung
Diamond 3.0	Visualisierung von Kristallstrukturen
Origin 5.0	Erstellung von Graphiken
ChemDraw Ultra 8.0	Visualisierung von organischen Molekülen sowie von Reaktionsgleichungen

3 Eigenschaften von Carbonsäuren

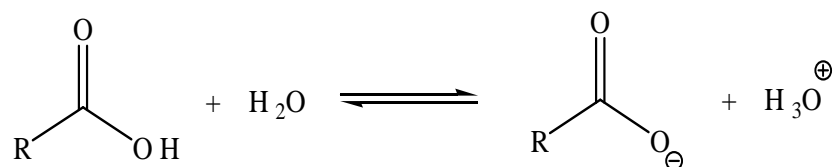
3.1 Definition einer Liebig-Säure^[41]

Liebig definierte als Säure diejenigen Wasserstoffverbindungen, in welchen der Wasserstoff ersetzbar ist durch die je nach Wertigkeit des Metalls ausgleichende Zahl von Metallatomen. Als Salz bezeichnet Liebig einen den Oxiden ähnlichen Körper, in welchem der Sauerstoff vertreten ist durch das Radikal einer Säure.

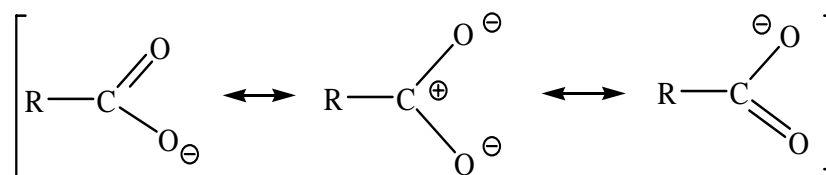
3.2 Eigenschaften von Carbonsäuren^[42, 43]

Auch wegen ihrer Häufigkeit in der Natur zählen Carbonsäuren zu den wichtigsten organischen Säuren. Ihre funktionelle Gruppe ist die Carboxylgruppe-COOH, mit welcher sie zwei Wasserstoffbrückenbindungen zueinander ausbilden können. Aufgrund dieser starken Wechselwirkung liegen die Siedepunkte deutlich höher als die der vergleichbaren Alkohole. Der Aggregatzustand wird geprägt durch die Länge und Komplexität der Alkylgruppe. So sind die einfachen Carbonsäuren farblose Flüssigkeiten mit stechendem Geruch, während der Einbau von aromatischen Systemen sowie weiteren Carboxylgruppen zu Feststoffen führt. Auch ihre Löslichkeit in Wasser wird durch den Alkylrest beeinflusst, so dass Carbonsäuren mit bis zu fünf Kohlenstoffatomen löslich und mit höherer Atomzahl unlöslich sind.

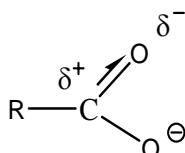
In wässriger Lösung gilt folgendes Dissoziationsgleichgewicht zwischen der Säure und dem zugehörigen Carboxylatanion:



Die Acidität der Carbonsäure wird von der Stabilisierung des Anions durch Mesomerie stark beeinflusst, weswegen sie stets acider sind als die entsprechenden Alkohole.



Weiteren Einfluss auf die Acidität nimmt das partiell positiv geladene Carbonylkohlenstoffatom, das das Einführen einer negativen Ladung begünstigt. Die partiell positive Ladung wird durch das zweite, elektronegative Sauerstoffatom verursacht.

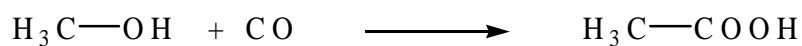


Desweiteren kann die Gruppe R durch den induktiven Effekt Einfluss nehmen auf die Säurestärke, wobei eine elektronenziehende Gruppe die Acidität steigern und eine elektronenschiebende Gruppe sie senken würde. Im Allgemeinen sind die Salze von Carbonsäuren kristalline, nicht flüchtige Festkörper.

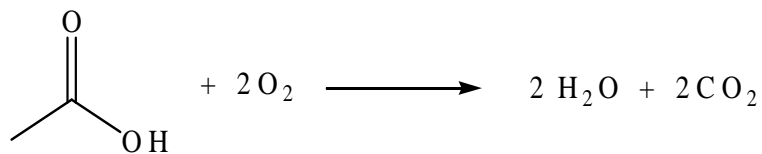
3.3 Eigenschaften der verwendeten Säuren^[42, 43, 44]

3.3.1 Essigsäure (HOAc)

Die Essigsäure ist eine farblose, ätzend wirkende, typisch nach Essig riechende Flüssigkeit. Sie besitzt einen pKs-Wert von 4,76, schmilzt bei 16,2°C und siedet bei 118°C. Die bedeutendste industrielle Herstellungsmethode für Essigsäure ist die katalytische Umsetzung von Methanol mit Kohlenmonoxid unter Druck.



Auch durch die Oxidation von Acetaldehyd oder von Kohlenwasserstoffen kann Essigsäure hergestellt werden. An der Luft verbrennt Essigsäure vollständig zu Wasser und Kohlendioxid.

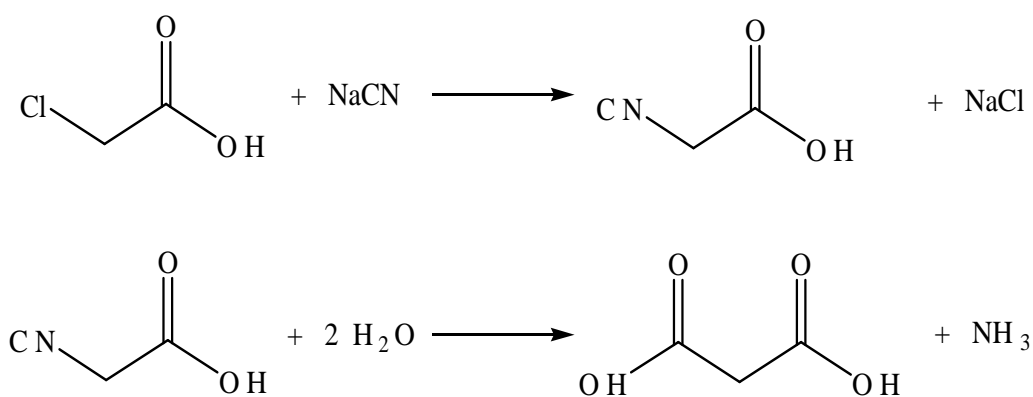


Essigsäure findet Verwendung als Konservierungs- und Säuerungsmittel bei Obst und Gemüse sowie anderen Lebensmitteln. Sie wird außerdem als Geschmacksstoff verwendet. Der Hausessig besteht aus einem Gemisch aus verdünntem, synthetischem Essig, Gärungsessig mit 5 % Essigsäure.

3.3.2 Malonsäure

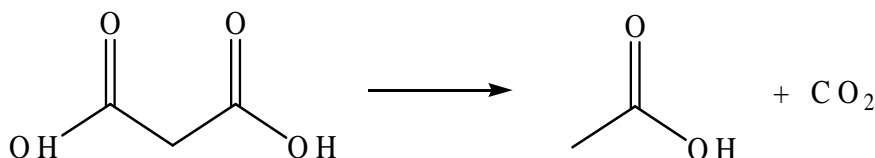
Die Malonsäure ist die einfachste Dicarbonsäure, deren Ester und Salze Malonate genannt werden. Sie bildet farb- und geruchlose Kristalle und schmilzt bei ca. 135°C.

Eine Synthesemöglichkeit besteht darin, Monochloressigsäure zunächst mit Natriumcyanid umzusetzen und anschließend die entstandene Cyanessigsäure zu hydrolysieren.



Allgemein treten bei den aliphatischen, langkettigen Dicarbonsäuren noch vor Beginn des Schmelzvorgangs unerwünschte Nebenreaktionen auf. Dies wäre zum Einen die Kondensation über eine oder auch über beide Carboxylgruppen, wobei zu unterscheiden ist

zwischen der intermolekularen bei den einfacheren Dicarbonsäuren und der zusätzlichen intramolekularen Kondensation bei den längeren Dicarbonsäuren zu Ringsystemen. Zum Anderem kann eine Decarboxylierung meist einer Carboxylgruppe auftreten. Dies führt bei der Malonsäure zur entsprechenden Monocarbonsäure, der Essigsäure.

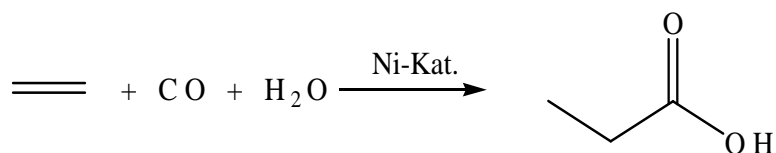


Malonsäure ist ein Synthesebaustein und dient beispielsweise zur Herstellung von Barbitursäure und deren Derivaten. Sie ist außerdem ein Zellgift, das durch Hemmung der Succinatdehydrogenase den Ablauf des Zitronensäurezyklus (Krebszyklus) hemmt.

3.3.3 Propionsäure (HOPr)

Die Propionsäure besitzt einen stechenden Geruch, reizt die Augen und Atemwege und führt zu Verätzungen. Sie ist im Vergleich zur Essigsäure eine etwas schwächere Säure mit einem pK_s -Wert von 4,85, schmilzt bereits bei -22°C und siedet bei 140°C . Salze und Ester dieser Säure werden als Propionate bezeichnet.

Propionsäure kommt in der Natur in einigen ätherischen Ölen vor. Sie wird auch bei der Gewinnung von Biogas aus organischen Abfällen gebildet. Sie wird großtechnisch aus Ethen, Kohlenmonoxid und Wasser hergestellt.



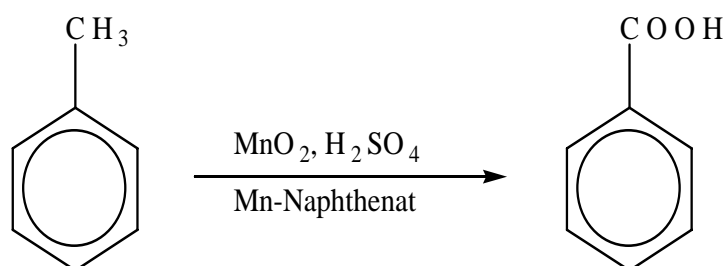
Die Propionsäure ist ein wichtiger Synthesebaustein zur Herstellung von Kunststoffen und Arzneimitteln. Sie wird auch zur Herstellung des zugehörigen Esters aus der Umsetzung mit einem Alkohol verwendet, da das Produkt als Riech- und Aromastoff sowie als Lösungsmittel

Anwendung findet. Aus der Umsetzung mit Cellulose wird ein hitzebeständiger und zäher Kunststoff gewonnen.

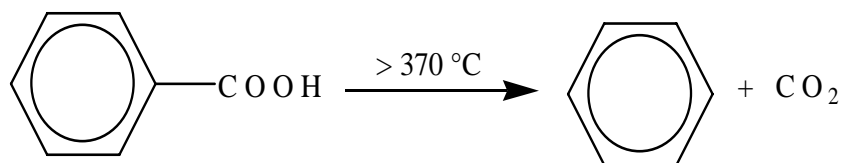
3.3.4 Benzoesäure (HOBz)

Die Benzoesäure ist die einfachste aromatische Carbonsäure. Sie bildet farblose, glänzende Blättchen oder nadelförmige Kristalle. Die Benzoesäure ist eine etwas stärkere Säure als die einfachste aliphatische Carbonsäure, die Essigsäure, mit einem pK_s -Wert von 4,18. Sie schmilzt bei 122°C und siedet bei 249°C . Die Salze der Benzoesäure sind die Benzoate.

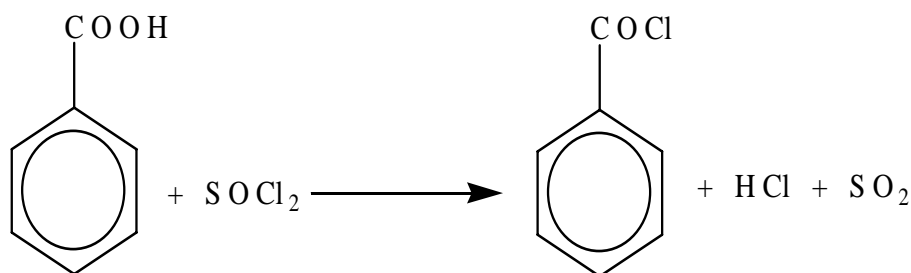
Sie wird technisch durch Oxidation von Toluol mit Braunstein und Schwefelsäure in Gegenwart von Mangannaphthenat hergestellt.



Oberhalb von 370°C tritt die Zersetzung zu Benzol und Kohlendioxid ein.

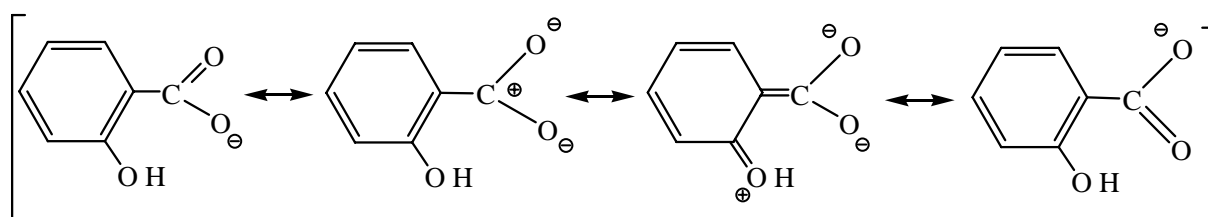


Als Säure findet sie Verwendung als Weichmacher. Ansonsten werden Benzoesäureester in der Parfümindustrie verwendet. Sie dient auch zur Darstellung von Benzoylverbindungen aus Alkoholen, Phenolen und Aminen durch Umsetzung mit Benzoylchlorid. Das Benzoylchlorid wird aus Benzoesäure durch Destillation mit Thionylchlorid gewonnen.

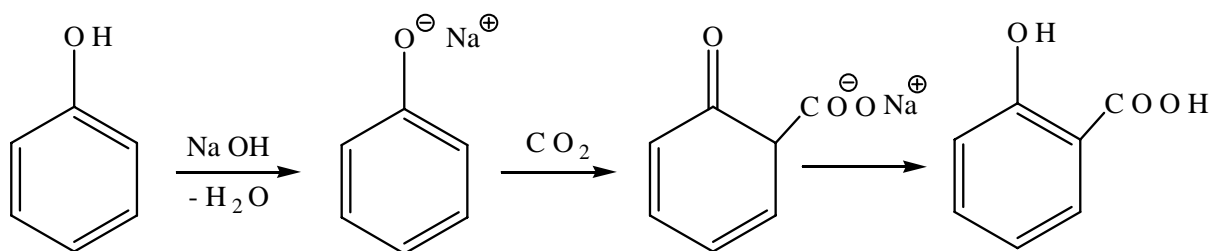


3.3.5 Salicylsäure

Die Salicylsäure bildet farblose Kristalle. Sie wurde früher vor allem aus der Rinde verschiedener Weiden (wissenschaftlich: *Salix spec.*) gewonnen. Sie ist mit einem pK_S -Wert von 2,97 acider als die homologe Benzoesäure, da die Alkoholfunktion in ortho-Position zur Carboxylgruppe das entstehende Anion über Mesomerie zusätzlich stabilisieren kann.



Die Salicylsäure schmilzt bei 159°C und siedet bei 211°C . Sie wird nach der Kolbe-Schmitt-Synthese aus Phenol gewonnen.



Salicylsäure wird zur Herstellung von Farb- und Riechstoffen verwendet. Sie dient auch zur Herstellung von Acetylsalicylsäure (ASS, Aspirinwirkstoff), die als schmerzstillendes und entzündungshemmendes Medikament wirkt.

3.4 Beschreibung der Koordination in Carboxylaten

Aufgrund der Komplexität der Koordinationen des Carboxylatanions an das Metallkation in den Verbindungen dieser Arbeit, ist ein Schema zur Beschreibung der unterschiedlichen Koordinationen erstellt worden. Es handelt sich um eine Erweiterung des von *Ouchi et al.* [45] vorgestellten Schemas.

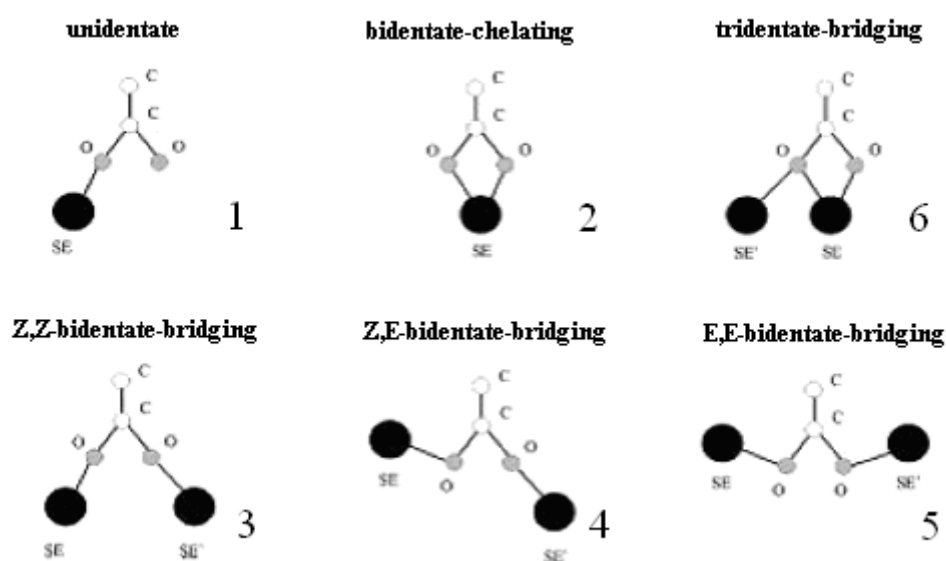


Abb. 8 : Ursprüngliche schematische Darstellung der Koordination der Carboxylgruppe [45].

Auch das neue Schema unterscheidet die koordinierenden Carboxylatanionen sowie Carbonsäuremoleküle nach ihrer Zähigkeit an dem Metallkation und ihrer verbrückenden Wirkung.

Des Weiteren soll die Verwendung der zugehörigen Symbole die Beschreibung verschiedener Koordinationsmuster innerhalb einer Verbindung vereinfachen und in den folgenden Kapiteln zur Beschreibung der Kristallstrukturen angewendet werden.

$x \Delta$ Zähigkeit der Carboxylateinheit

μ_y Zahl der Verbrückungen pro Sauerstoffatom




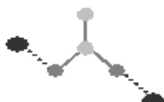

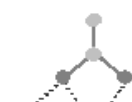

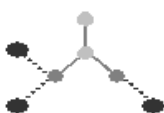



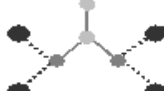
Koordination	Symbol	Beschreibung
	1Δ	einzähnig (unidentate)
	2Δ	zweizähnig-chelatisierend (bidentate-chelating)
	$2\Delta, \mu_2$	Z,Z-zweizähnig-verbrückend (bidentate-bridging)
	$2\Delta, \mu_1, \mu_1'$	Z,E-zweizähnig-verbrückend (bidentate-bridging)
	$2\Delta, \mu_2'$	E,E-zweizähnig-verbrückend (bidentate-bridging)
	$3\Delta, \mu_1$	Z-dreizähnig-chelatisierend (tridentate-chelating)
	$3\Delta, \mu_1'$	E-dreizähnig-chelatisierend (tridentate-chelating)
	$3\Delta, \mu_2, \mu_1'$	E-dreizähnig-verbrückend (tridentate-bridging)
	$4\Delta, \mu_2$	Z,Z-vierzähnig-chelatisierend (tetradentate-chelating)
	$4\Delta, \mu_1, \mu_1'$	Z,E-vierzähnig-chelatisierend (tetradentate-chelating)
	$4\Delta, \mu_2'$	E,E-vierzähnig-chelatisierend (tetradentate-chelating)
	$4\Delta, \mu_2, \mu_2'$	E,E-vierzähnig-verbrückend (tetradentate-bridging)

Abb. 9 : Neue schematische Darstellung der Koordination.

Das Schema beginnt bei der einzähnigen Koordination (unidentate) eines Carboxylatanions, mit nur einer Bindung eines Carboxylat-Sauerstoffatoms an das Metallkation.

Bei der zweizähnigen Koordination (bidentate) unterscheidet man zwischen der chelatisierenden (chelating) und der verbrückenden (bridging) Variante. Im ersten Fall koordinieren beide Sauerstoffatome eines Carboxylatanions an dasselbe Metallkation. Im zweiten Fall koordinieren die beiden Sauerstoffatome eines Carboxylatanions verschiedene Metallkationen und verbrücken diese entweder in gleicher Richtung (Z,Z; E,E) oder in entgegengesetzter Richtungen (Z,E).

Bei der dreizähnigen Koordination können wieder die beiden Fälle, chelatisierend und verbrückend, unterschieden werden. Im Falle der chelatisierenden Koordination werden über die zweite Bindung eines Sauerstoffatoms des Carboxylatanions zwei Metallkationen in gleicher Richtung (Z) oder in entgegengesetzter Richtung (E) verknüpft. Im Falle der verbrückenden Koordination werden über die dritte Bindung drei Metallkationen verknüpft.

Zuletzt ist noch die vierzählige Koordination zu betrachten. Auch hier unterscheidet man zwischen der chelatisierenden und der verbrückenden Bindungsart. Bei der chelatisierenden können die jeweils zweiten Bindungen der Sauerstoffatome des Carboxylatanions drei Metallkationen in gleicher Richtung (Z,Z), in entgegengesetzter Richtung (E,E) oder in je einer Richtung (Z,E) verknüpfen. Im Falle der verbrückenden Koordination werden über die beiden zusätzlichen Bindungen der beiden Sauerstoffatome eines Carboxylatanions vier Metallkationen verknüpft.

4 Neue Übergangsmetallcarboxylate

4.1 Wasserfreie Seltenerdacetate

4.1.1 Einleitung

Die bisher bekannten Acetate der Seltenerdmetalle sind bevorzugt aus essigsauren Lösungen ihrer Salze, z.B. aus dem Oxid oder dem Carbonat, erhalten worden. Einkristalle des Scandiumacetats konnten auf diese Weise durch langsames Einengen einer wässrigen Lösung hergestellt werden [2]. Einkristalle des Lutetium- und des Holmiumacetats sind aus essigsauren Lösungen ihrer Oxide durch Aussalzen mit Caesiumacetat erhalten worden [5]. Ein weiterer Syntheseweg ist die Herstellung von Kristallen des Lanthan- und des Praseodymacetats aus einer Schmelze von Lanthanoxid bzw. Praseodymacetathydrat und Ammoniumacetat in einer abgeschmolzenen Glasampulle bei milden Temperaturen [3,4]. Alle weiteren Seltenerdacetate wurden bisher nur in Form von Pulvern erhalten, mit Hilfe von Röntgen-Aufnahmen charakterisiert und den jeweiligen Kristalltypen zugeordnet.

Als Kristalltypen der Seltenerdacetate $M(\text{OAc})_3$ treten auf der Sc-Typ ($M = \text{Sc}$), der La-Typ ($M = \text{La, Ce}$), der Pr-Typ ($M = \text{Pr}$), der Ho-Typ ($M = \text{Sm} - \text{Er}$ und Y) und der Lu-Typ ($M = \text{Tm} - \text{Lu}$) (Tabelle 1). Beim Sc-Typ kristallisiert das Acetat hexagonal in der Raumgruppe $P6_3/mcm$. Es handelt sich um eine Kettenstruktur mit 6fach koordinierten Scandiumatomen aus sechs $2\Delta, \mu_2$ -koordinierenden Acetatliganden. Der Sc–O–Abstand beträgt 208,4(1) pm. Beim La-Typ kristallisiert das Acetat trigonal in der Raumgruppe $R\bar{3}$. Die Kristallstruktur besteht aus einem dreidimensionalen Gerüst von zehnfach koordinierten Lanthanatomen. Pro Lanthanatom sind zwei $4\Delta - \mu_2$ und $2\Delta - \mu_2$ -koordinierende Acetatliganden an der Verknüpfung beteiligt. Der mittlere La–O–Abstand beträgt 261,5 pm. Das Praseodymacetat kristallisiert in der tetragonalen Raumgruppe $P4_2/c$. Die Struktur enthält drei röntgenographisch unterschiedliche Praseodymlagen, zweimal neunfach und einmal zehnfach koordiniert. Die Praseodymatome werden durch 2Δ -, $2\Delta, \mu_2$ -, $3\Delta, \mu_1$ - und $4\Delta, \mu_2$ -koordinierenden Acetatliganden zu einem dreidimensionalen Gerüst verknüpft. Der mittlere Pr–O–Abstand beträgt 256,7 pm. Der Ho-Typ tritt in der monoklinen Raumgruppe $C2/c$ auf. Die Struktur besteht aus Ketten mit achtfach koordinierten Holmiumatomen aus zwei $2\Delta, \mu_2$ - und vier $3\Delta, \mu_1$ -koordinierenden Acetatliganden. Der mittlere Ho–O–Abstand beträgt

237,6 pm. Der Lu-Typ bildet das Bindeglied zwischen den Kettenstrukturen des sechsfach koordinierten Scandiumatoms und des achtfach koordinierten Holmiumatoms. $\text{Lu}(\text{OAc})_3$ kristallisiert orthorhombisch in der Raumgruppe $\text{Ccm}2_1$. Es handelt sich ebenfalls um eine Kettenstruktur mit siebenfach koordinierten Lutetiumatomen aus vier $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -koordinierenden Acetatliganden. Der mittlere Lu–O–Abstand beträgt 227,5 pm.

Tabelle 1. Übersicht und Beschreibung aller Kristallmodifikationen der Seltenerdacetate $\text{SE}(\text{OAc})_3$.

Kristalltyp von $\text{SE}(\text{OAc})_3$	Raumgruppe und Strukturmerkmale	Atomabstände in [pm]
Sc-Typ, M = Sc ^[1]	hexagonal, $\text{P}6_3/\text{mcm}$, CN = 6, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Sc-Sc}} \rangle = 443,3$ $d_{\text{Sc-O}} = 208,4(1)$
La-Typ, M = La ^[2] , Ce	trigonal, $\text{R}\bar{3}$, CN = 10, Raumnetzstruktur	$\langle d_{\text{La-La}} \rangle = 427,2$ $\langle d_{\text{La-O}} \rangle = 261,5$
Pr-Typ, M = Pr ^[3]	tetragonal, $\text{P}\bar{4}2_1\text{c}$, CN = 9, 10, Raumnetzstruktur	$\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 416,7$ $\langle d_{\text{Pr-O}} \rangle = 256,7$
Ho-Typ, M = Sm-Er, Y ^[4]	monoklin, $\text{C}2/\text{c}$, CN = 8, Kettenstruktur	$d_{\text{Ho-Ho}} = 393,7(1)$ $\langle d_{\text{Ho-O}} \rangle = 237,6$
Lu-Typ, M = Tm-Lu ^[4]	orthorhombisch, $\text{Ccm}2_1$, CN = 7, Kettenstruktur	$d_{\text{Lu-Lu}} = 419,3(5)$ $\langle d_{\text{Lu-O}} \rangle = 227,5$

Im Rahmen dieser Arbeit konnten Einkristalle von Europiumacetat $\text{Eu}(\text{OAc})_3$, Thulium- und Ytterbiumacetat $\text{SE}(\text{OAc})_3$ erhalten und der Ho- und Lu-Typ damit bestätigt werden. Durch das Neodymacetat $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ ist die Reihe der Seltenerdacetate vervollständigt und ein neuer Strukturtyp erhalten worden.

4.1.2 Neodymacetat^[6], $\text{Nd}(\text{OAc})_3$

4.1.2.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Neodymacetat $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ konnte bei der Umsetzung von 72,1 mg ($0,5 \cdot 10^{-3}$ mol) Neodym mit 140,1 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Malonsäure erhalten werden. Das Gemisch wurde 5 Tage bei 180°C erhitzt und einer zweitägigen Temperung bei 140°C ausgesetzt. Wie bereits im Abschnitt 3.2.2 erwähnt, ist dabei die Malonsäure unter Decarboxylierung zur Essigsäure zerfallen. $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ kristallisiert in Form von rosa Polyedern.

$\text{Nd}(\text{OAc})_3$ kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $P2_1/a$ (Nr. 14) mit $a = 2201,7(2)$, $b = 1849,9(2)$, $c = 2419,0(3)$ pm, $\beta = 96,1(3)^\circ$, $V = 9796,8(1) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0430$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 2 zusammengefasst.

Tabelle 2. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Summenformel	$\text{C}_6\text{H}_9\text{O}_6\text{Nd}$	Molmasse [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$]	321,37
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	10
Strahlung	Mo-K_α	Detektorabstand (mm)	140
Temperatur (K)	293(2)	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,64 - 50,53
Indexbereich	$-26 \leq h \leq 25$	Anzahl gemessener Reflexe	78369
	$-21 \leq k \leq 21$	Anzahl unabhängiger Reflexe	17257
	$-28 \leq l \leq 28$	Anzahl beobachteter Reflexe	6972
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
	$0^\circ \leq \omega \leq 60^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	5,295
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,3391/0,4968
Anzahl der Bilder	120		
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,1·0,1·0,1	Kristallform	Polyeder
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	$P2_1/a$ (Nr. 14)
a (pm)	2201,7(2)		
b (pm)	1850,0(1)	β ($^\circ$)	96,1(3)
c (pm)	2419,0(3)		
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	9796,8(2)	Formeleinheiten Z	40
Dichte ρ_{calc} ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	2,179	F(000)	6120
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	1172
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0430$	Restelektronendichte ($10^6 \text{ e} \cdot \text{pm}^{-3}$)	-2,051/1,479
	$wR_2 = 0,0522$	Goodness of fit	0,652
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,1380$	Wichtungsparemeter a/b	0/0
	$wR_2 = 0,0671$	CCDC-Nummer	653325

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Die Kristallstruktur ist aus Schichten aufgebaut, die aus verknüpften Ringen bestehen, die entlang [100] und [001] aufgespannt werden. Sie enthält zehn röntgenographisch unterschiedliche Neodymlagen. In den Schichten sind zwei Ringarten mit unterschiedlicher Reihenfolge der Neodymatome vertreten (Abb. 10):

Ringart 1 Nd5 – Nd9 – Nd4 – Nd6 – Nd10 – Nd9 – Nd5 – Nd1 – Nd2 – Nd8

Ringart 2 Nd3 – Nd7 – Nd1 – Nd8 – Nd2 – Nd7 – Nd3 – Nd4 – Nd10 – Nd6

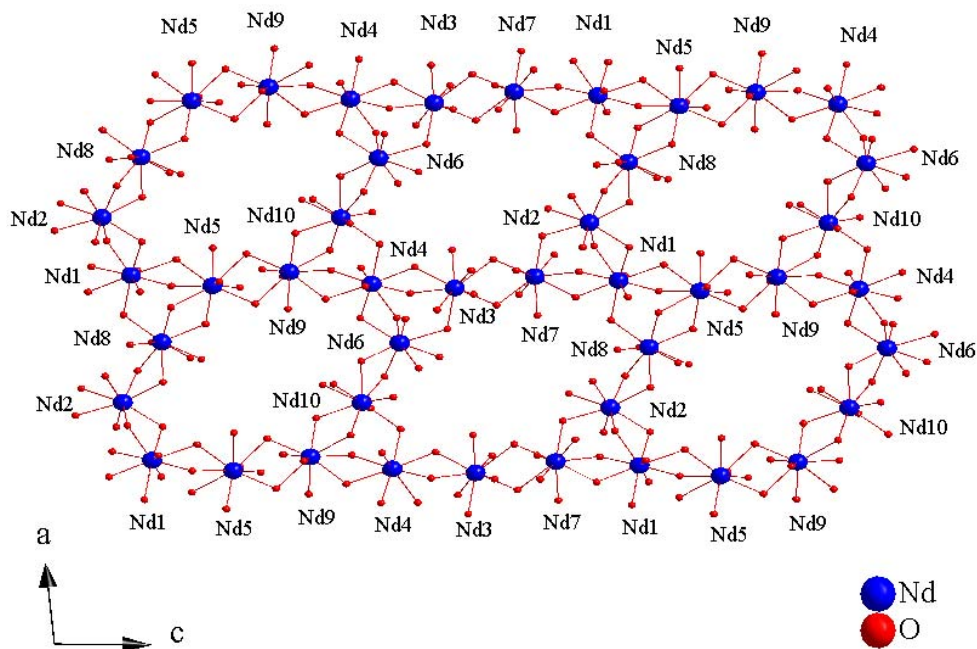


Abb. 10 : Perspektivische Darstellung einer Schicht entlang [010] in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Entlang [100] wird die jeweilige Ringart beibehalten, während sie entlang [001] abwechselnd auftreten. Nd1 ist neunfach koordiniert und mit Nd(2, 5, 7, 8) über sieben Acetatanionen verbrückt, bestehend aus drei $3\Delta, \mu_2, \mu_1$, zwei $4\Delta, \mu_2$ und ein $3\Delta, \mu_1$ (Abb. 11).

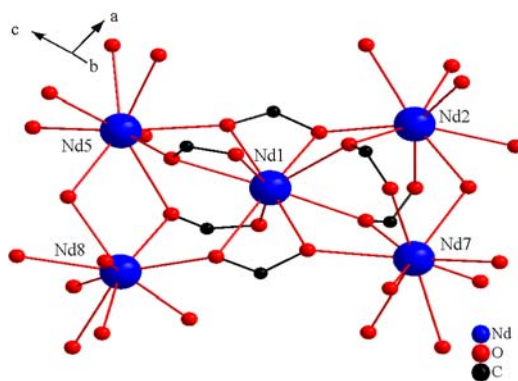


Abb. 11 : Perspektivische Darstellung der Nd1-Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd2 ist achtfach koordiniert und mit Nd(1, 7, 8) über acht Acetatanionen verbrückt, bestehend aus vier $3\Delta, \mu_1$, zwei $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und ein $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 12).

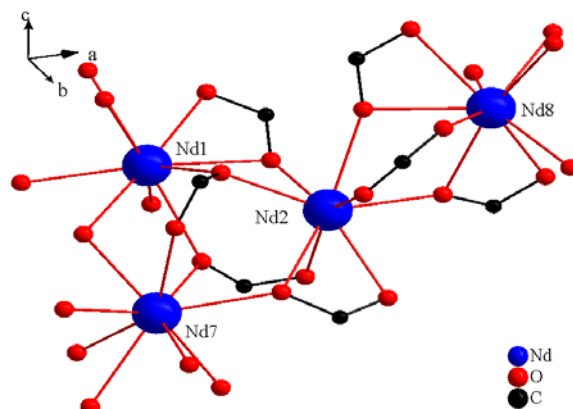


Abb. 12 : Perspektivische Darstellung der Nd2–Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd3 ist neunfach koordiniert und mit Nd(4, 6, 7) über acht Acetatanionen verbrückt, bestehend aus vier $3\Delta, \mu_1$, zwei $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und zwei $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 13).

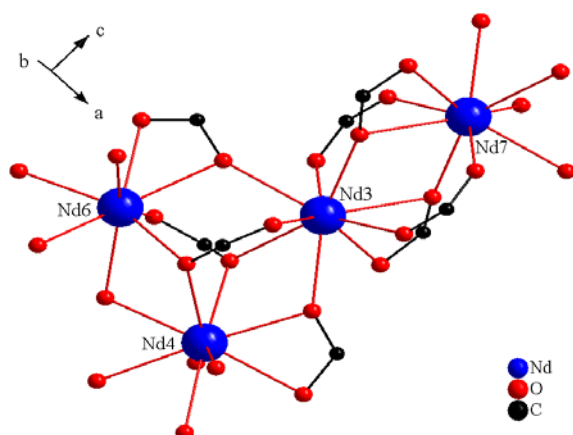


Abb. 13 : Perspektivische Darstellung der Nd3–Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd4 ist neunfach koordiniert und mit Nd(3, 6, 9, 10) über sechs Acetatanionen verbrückt, bestehend aus drei $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$, zwei $4\Delta, \mu_2$ und ein $3\Delta, \mu_1$ (Abb. 14).

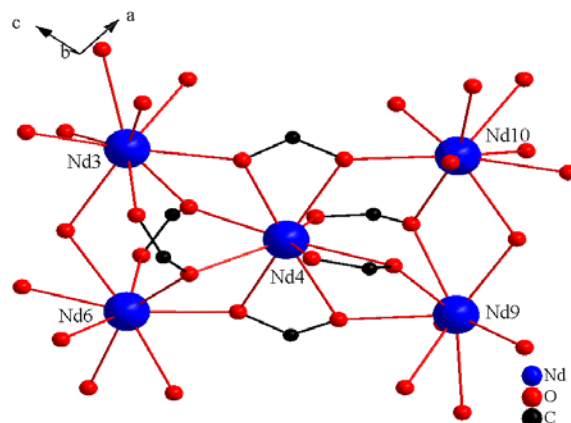


Abb. 14 : Perspektivische Darstellung der Nd4-Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd5 ist neunfach koordiniert und mit Nd(1, 8, 9) über acht Acetatanionen verbrückt, bestehend aus fünf $3\Delta, \mu_1$, zwei $2\Delta, \mu_2$ und ein $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ (Abb. 15).

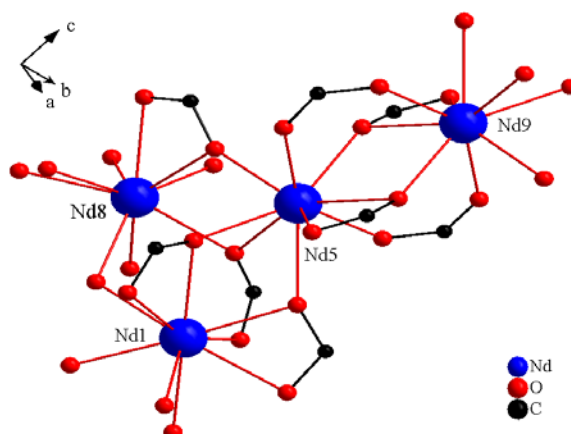


Abb. 15 : Perspektivische Darstellung der Nd5-Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd6 ist achtfach koordiniert und mit Nd(3, 4, 10) über sieben Acetatanionen verbrückt, bestehend aus vier $3\Delta, \mu_1$, zwei $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und ein $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 16).

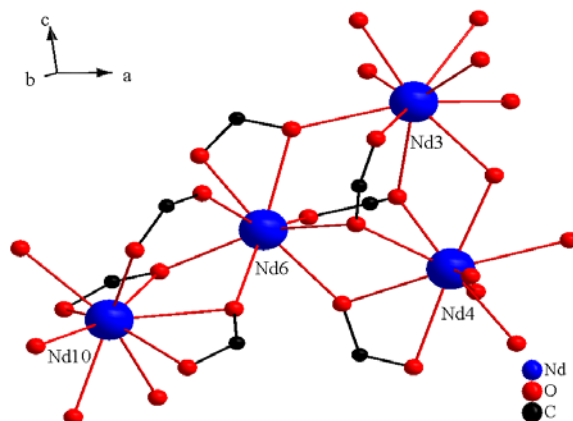


Abb. 16 : Perspektivische Darstellung der Nd6–Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd7 ist neunfach koordiniert und mit Nd(1, 2, 3) über acht Acetatanionen verbrückt, bestehend aus vier $3\Delta, \mu_1$, zwei $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und zwei $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 17).

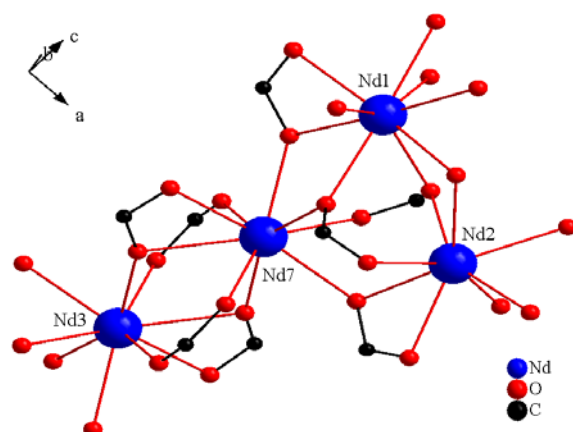


Abb. 17 : Perspektivische Darstellung der Nd7–Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd8 ist neunfach koordiniert und mit Nd(1, 2, 5) über sechs Acetatanionen verbrückt, bestehend aus vier $3\Delta, \mu_1$, ein $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und ein $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 18).

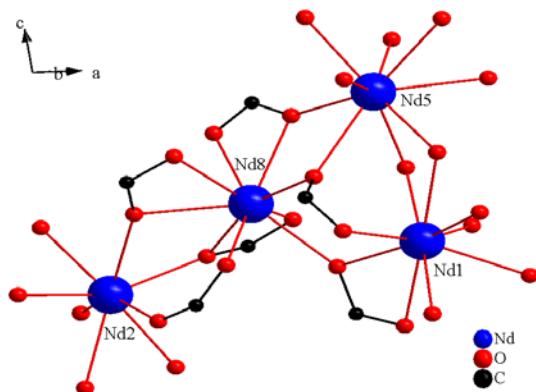


Abb. 18 : Perspektivische Darstellung der Nd8–Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd9 ist neunfach koordiniert und mit Nd(4, 5, 10) über acht Acetatanionen verbrückt, bestehend aus fünf $3\Delta, \mu_1$, ein $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und zwei $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 19).

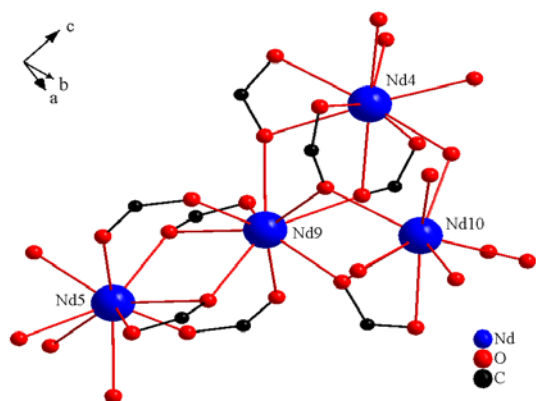


Abb. 19 : Perspektivische Darstellung der Nd9–Umgebung in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Nd10 ist neunfach koordiniert und mit Nd(4, 6, 9) über sechs Acetatanionen verbrückt, bestehend aus vier $3\Delta, \mu_1$, ein $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ und ein $2\Delta, \mu_2$ (Abb. 20).

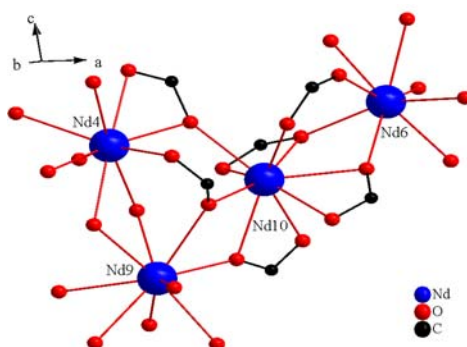


Abb. 20 : Perspektivische Darstellung der Nd10–Umgebung in Nd(OAc)₃.

Die Nd–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 235,0(1) und 266,6(9) pm mit einem Mittelwert von 249,2 pm. Die Nd–Nd–Abstände liegen zwischen 391,7(1) und 435,1(1) pm mit einem Mittelwert von 412,4 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 3 zusammengefasst.

Tabelle 3. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in Nd(OAc)₃.

Nd1	O40	244,6(9)	Nd1	Nd2	391,7(1)
Nd1	O15	247,1(9)	Nd1	Nd5	408,8(1)
Nd1	O61	250,5(8)	Nd1	Nd7	416,1(1)
Nd1	O41	252,3(10)	Nd1	Nd8	426,1(1)
Nd1	O28	253,2(11)			
Nd1	O18	253,8(9)	<Nd1	Nd>	410,7
Nd1	O55	255,6(9)	<Nd1	O>	252,1
Nd1	O11	255,7(10)			
Nd1	O59	255,9(9)			
Nd2	O69	236,6(10)	Nd2	Nd1	391,7(1)
Nd2	O17	241,0(10)	Nd2	Nd7	432,2(1)
Nd2	O11	246,1(8)	Nd2	Nd8	406,6(1)
Nd2	O61	246,2(9)			
Nd2	O60	247,7(10)	<Nd2	Nd>	410,2
Nd2	O62	248,3(10)	<Nd2	O>	245,9
Nd2	O33	251,0(10)			
Nd2	O20	251,0(9)			

Nd3	O29	237,2(8)	Nd3	Nd4	414,8(1)
Nd3	O49	242,5(10)	Nd3	Nd6	435,1(1)
Nd3	O27	243,1(9)	Nd3	Nd7	403,1(1)
Nd3	O42	248,4(10)			
Nd3	O46	252,9(8)	<Nd3	Nd>	417,7
Nd3	O44	254,9(11)	<Nd3	O>	250,6
Nd3	O66	256,2(10)			
Nd3	O24	258,9(9)			
Nd3	O26	261,7(11)			
Nd4	O72	245,4(10)	Nd4	Nd3	414,8(1)
Nd4	O67	247,2(10)	Nd4	Nd6	392,7(1)
Nd4	O46	247,8(9)	Nd4	Nd9	413,8(1)
Nd4	O19	250,5(10)	Nd4	Nd10	424,5(1)
Nd4	O37	251,3(9)			
Nd4	O12	251,6(9)	<Nd4	Nd>	411,5
Nd4	O24	251,7(9)	<Nd4	O>	251,1
Nd4	O43	253,9(10)			
Nd4	O35	260,6(10)			
Nd5	O51	240,9(10)	Nd5	Nd1	408,8(1)
Nd5	O54	241,0(10)	Nd5	Nd8	419,2(1)
Nd5	O59	241,4(8)	Nd5	Nd9	397,6(1)
Nd5	O30	243,3(11)			
Nd5	O13	245,2(8)	<Nd5	Nd>	408,5
Nd5	O41	252,7(9)	<Nd5	O>	248,8
Nd5	O22	253,5(10)			
Nd5	O45	254,7(11)			
Nd5	O39	266,6(9)			
Nd6	O23	236,6(10)	Nd6	Nd3	435,1(1)
Nd6	O21	241,2(10)	Nd6	Nd4	392,7(1)
Nd6	O57	245,4(9)	Nd6	Nd10	403,1(1)
Nd6	O12	245,7(8)			
Nd6	O37	245,9(9)	<Nd6	Nd>	410,3
Nd6	O31	247,4(9)	<Nd6	O>	245,5
Nd6	O63	250,4(10)			
Nd6	O66	251,3(10)			

Nd7	O26	237,3(9)	Nd7	Nd1	416,1(1)
Nd7	O48	238,2(9)	Nd7	Nd2	432,2(1)
Nd7	O34	240,2(10)	Nd7	Nd3	403,1(1)
Nd7	O50	248,3(11)			
Nd7	O15	252,8(9)	<Nd7	Nd>	417,1
Nd7	O33	253,1(10)	<Nd7	O>	249,2
Nd7	O58	255,0(10)			
Nd7	O18	258,2(9)			
Nd7	O29	259,5(10)			
Nd8	O68	235,0(11)	Nd8	Nd1	426,1(1)
Nd8	O65	247,6(10)	Nd8	Nd2	406,6(1)
Nd8	O30	247,9(11)	Nd8	Nd5	419,2(1)
Nd8	O17	250,0(10)			
Nd8	O28	250,6(8)	<Nd8	Nd>	417,3
Nd8	O25	252,2(9)	<Nd8	O>	249,5
Nd8	O39	252,7(9)			
Nd8	O52	254,5(10)			
Nd8	O20	255,2(9)			
Nd9	O32	240,6(9)	Nd9	Nd4	413,8(1)
Nd9	O38	241,7(10)	Nd9	Nd5	397,6(1)
Nd9	O35	243,0(9)	Nd9	Nd10	412,6(1)
Nd9	O14	243,6(10)			
Nd9	O22	246,8(8)	<Nd9	Nd>	408,0
Nd9	O13	254,1(10)	<Nd9	O>	249,4
Nd9	O47	254,5(11)			
Nd9	O43	254,8(9)			
Nd9	O64	265,6(10)			
Nd10	O53	241,8(11)	Nd10	Nd4	424,5(1)
Nd10	O14	248,0(10)	Nd10	Nd6	403,1(1)
Nd10	O36	248,3(9)	Nd10	Nd9	412,6(1)
Nd10	O21	248,8(10)			
Nd10	O19	250,5(9)	<Nd10	Nd>	413,4
Nd10	O64	250,8(11)	<Nd10	O>	250,1
Nd10	O31	253,9(9)			
Nd10	O16	254,3(10)			
Nd10	O56	254,8(10)			

Die Lücken innerhalb der Ringe einer Schicht werden durch den aliphatischen Rest der Acetatgruppen aufgefüllt (Abb. 21).

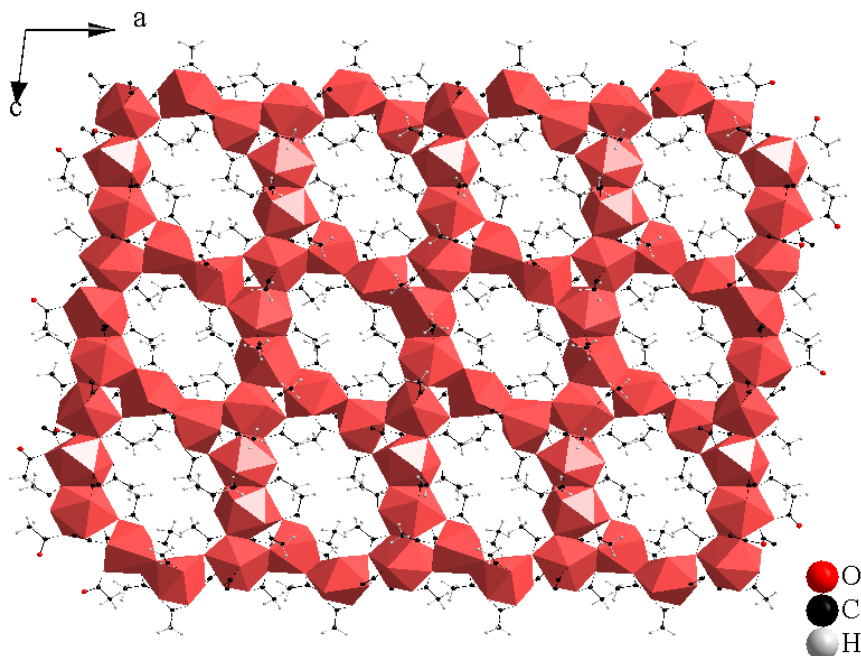


Abb. 21 : Polyedrische Darstellung einer Schicht entlang [010] in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Direkt benachbarte Schichten sind gegeneinander verschoben, so dass keine Kanäle gebildet werden, in denen Platz für Einlagerungen geschaffen werden könnte (Abb. 22).

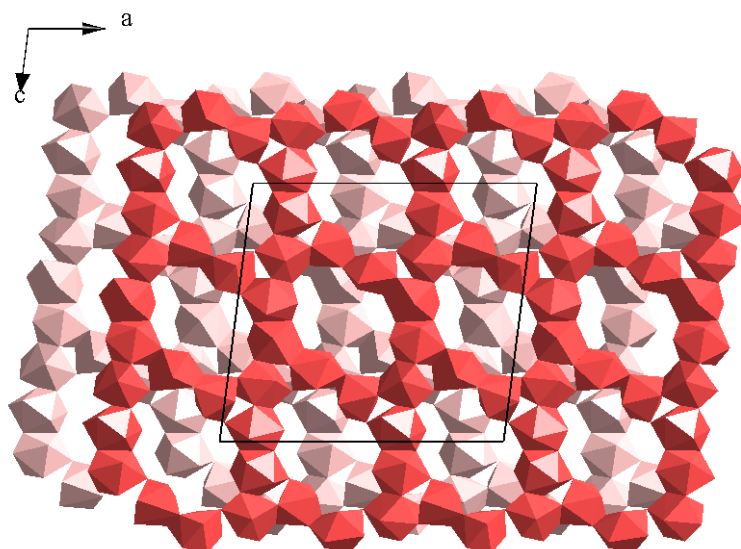


Abb. 22 : Polyedrische Darstellung zweier übereinander liegender Schichten entlang [010] in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Wie Abb. 23 zeigt, handelt es sich um wellenartige Schichten, die in einer AB–Stapelfolge angeordnet sind. Da die Schichten zueinander versetzt und wellenartig vorliegen, wird sämtlicher Raumanspruch zwischen und innerhalb der Schichten ausgefüllt.

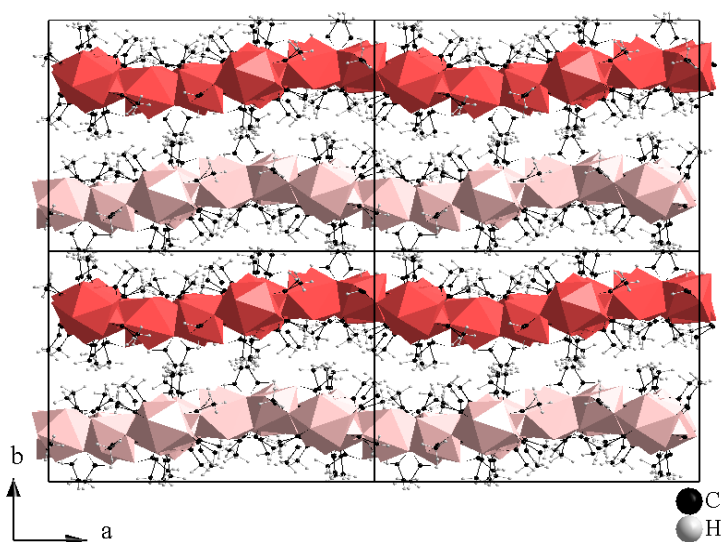


Abb. 23 : Polyedrische Darstellung übereinander liegender Schichten entlang [001] in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

4.1.2.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 24 gegenübergestellt. Das erhaltene Produkt ist nicht phasenrein. Als Nebenprodukte können auftreten z.B. Acetathydrate oder eventuell das Malonat des Neodyms. Vergleiche mit hinterlegten Pulverdaten lassen keine genaue Aussage zu.

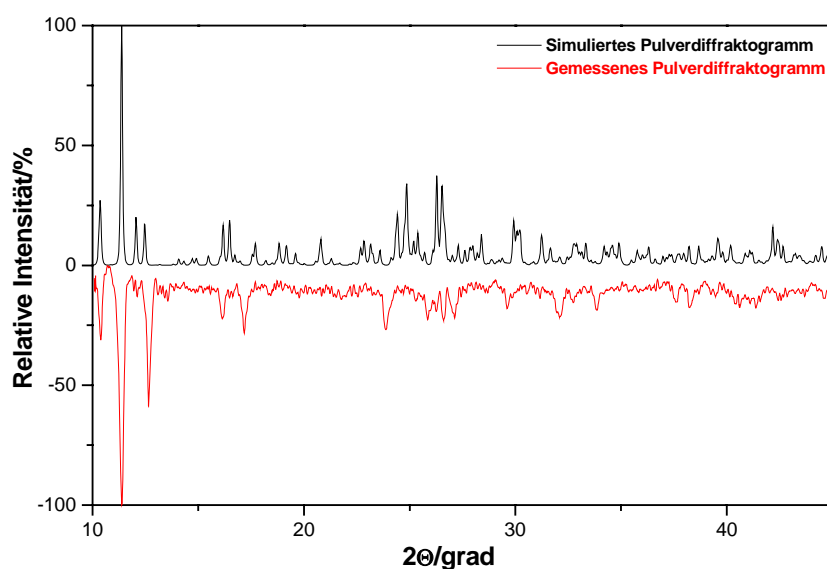


Abb. 24 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

4.1.3 Europiumacetat^[7], Eu(OAc)₃

4.1.3.1 Synthese und Kristallstruktur

Europiumacetat Eu(OAc)₃ wurde aus der Umsetzung von 151,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Europium und 0,2 ml ($3,5 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure hergestellt. Das Gemisch wurde 11 Tage bei 130°C erhitzt. Eu(OAc)₃ bildet farblose, nadelförmige Kristalle.

Das Koordinationspolymer Eu(OAc)₃ kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe C2/c (Nr. 15) mit $a = 1126,0(3)$, $b = 2900,5(6)$, $c = 799,1(2)$ pm, $\beta = 132,0(1)^\circ$, $V = 1938,6(8) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0374$ [$I > 2\sigma(I)$]. Eu(OAc)₃ ist isotyp zum Holmiumacetat Ho(OAc)₃ und war bisher nur aus Pulverdaten bekannt. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 4 wiederzufinden.

Tabelle 4. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von Eu(OAc)₃.

Summenformel	C ₆ H ₉ O ₆ Eu	Molmasse [g·mol ⁻¹]	329,09
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS I	Belichtungszeit (min)	6
Strahlung	Mo-K _α	Detektorabstand (mm)	60
Temperatur (K)	293(2)	2θ-Bereich (°)	3,8 - 56,3
Indexbereich	$-14 \leq h \leq 14$	Anzahl gemessener Reflexe	9047
	$-38 \leq k \leq 38$	Anzahl unabhängiger Reflexe	2196
	$-9 \leq l \leq 9$	Anzahl beobachteter Reflexe	1248
Scan-Modus	$0^\circ \leq \varphi \leq 200^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\varphi = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	6,466
Anzahl der Bilder	100	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,3661/0,4329
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm ³)	0,5·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	C2/c (Nr. 15)
a (pm)	1126,0(3)		
b (pm)	2900,5(6)	β (°)	132,0(3)
c (pm)	799,1(2)		
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	1938,6(8)	Formeleinheiten Z	8
Dichte ρ_{calc} (g·cm ⁻³)	2,255	F(000)	1248
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	121
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0374$	Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-1,874/1,946
	$wR_2 = 0,0643$	Goodness of fit	0,881
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0831$	Wichtungsparameter a/b	0,0264/0
	$wR_2 = 0,0732$	CCDC-Nummer	601933

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + b \cdot P] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Europium(III)-acetat kristallisiert in einer Kettenstruktur. Die Ketten verlaufen entlang [001]. $\text{Eu}(\text{OAc})_3$ beinhaltet zwei röntgenographisch unterschiedliche Europiumlagen, beide achtfach koordiniert. Eu1 und Eu2 sind durch ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verknüpft. Das Verknüpfungsmuster rotiert pro Bindung um 180° entlang der Kette (Abb. 25).

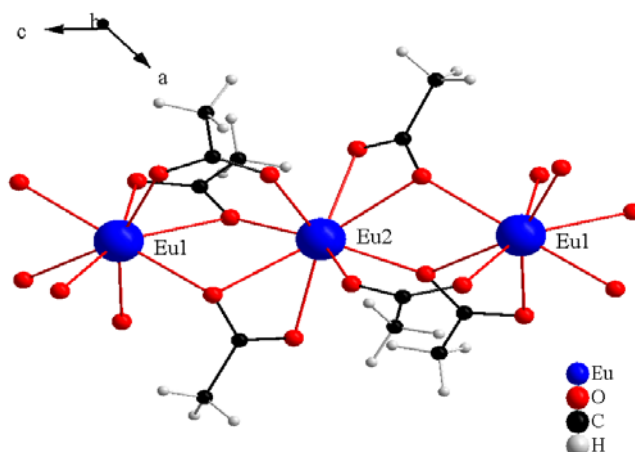


Abb. 25 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Eu^{3+} in $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

Die Ketten sind nahezu linear mit $\varphi(\text{Eu1}, \text{Eu2}, \text{Eu1}) = \varphi(\text{Eu2}, \text{Eu1}, \text{Eu2}) = 174,9(4)^\circ$. Die Eu–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 228,8(6) und 256,6(6) pm mit einem Mittelwert von 242,4 pm. Der Eu–Eu-Abstand beträgt 400,0(1) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 5 zusammengefasst.

Tabelle 5. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte bei $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

2xEu1	O211	228,8(6)	2xEu2	O212	230,6(6)
2xEu1	O311	239,6(6)	2xEu2	O112	238,2(6)
2xEu1	O111	245,2(7)	2xEu2	O312	244,3(6)
2xEu1	O112	256,6(6)	2xEu2	O311	255,7(6)
<hr/>					
<Eu1	O>	242,5	<Eu2	O>	242,2
Eu1	Eu2	400,0(1)			

Direkt benachbarte Ketten sind um eine Europiumlage zueinander verschoben, wodurch der aliphatische Rest sich so anordnen kann, dass eine möglichst dichte Packung entsteht (Abb. 26).

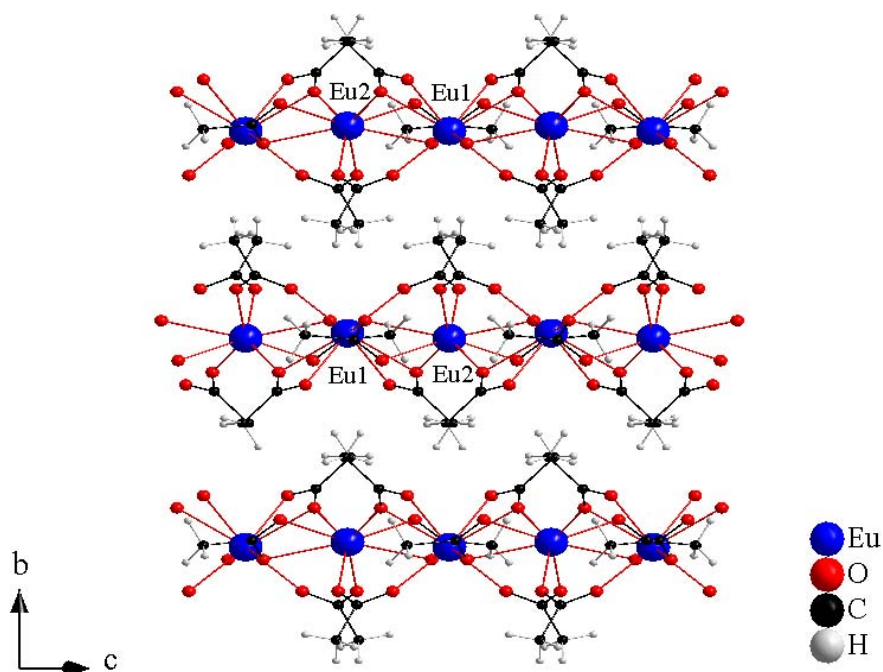


Abb. 26 : Perspektivische Darstellung von übereinander liegenden Ketten in $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

Die Ketten, entlang $[100]$ angeordnet, sind kristallographisch identisch. Die Stapelfolge entlang $[010]$ lässt sich beschreiben als $\text{ABA}'\text{B}'$, d.h. die Ketten AB bzw. $\text{A}'\text{B}'$ verlaufen entlang $[100]$ parallel zueinander und unterscheiden sich, wie bereits erwähnt, nur in der Besetzung der Europiumlagen. Die Kettenpaare AB und $\text{A}'\text{B}'$ sind zusätzlich um eine Kettenposition entlang $[100]$ zueinander verschoben (Abb. 27).

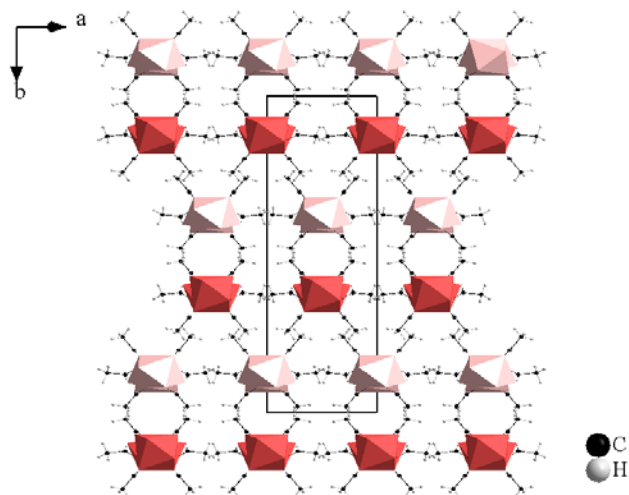


Abb. 27 : Perspektivische Darstellung der Stapelfolge entlang [001] in $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

4.1.3.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Eu}(\text{OAc})_3$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Mo-Strahlung ($\lambda = 0,7093 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 28 gegenübergestellt. Das erhaltene Produkt sieht phasenrein aus.

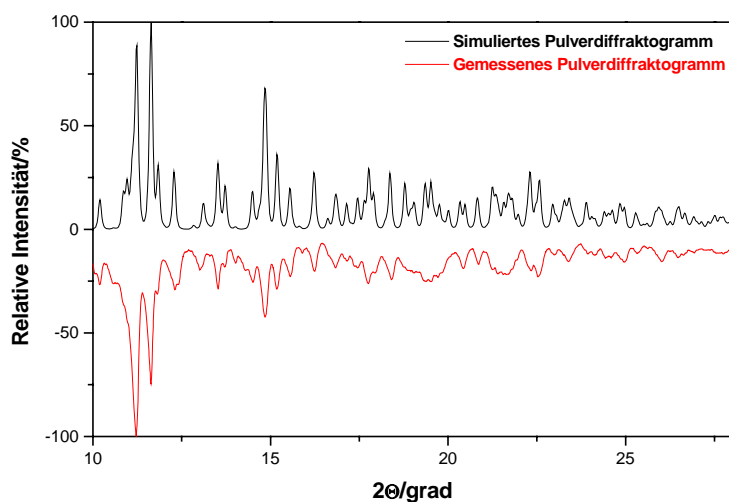


Abb. 28 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

4.1.4 Thulium- und Ytterbiumacetat, SE(OAc)₃

4.1.4.1 Synthese und Kristallstrukturen

Die isotypen, wasserfreien Acetate von Thulium und Ytterbium, SE(OAc)₃ (SE = Tm, Yb) sind aus der Umsetzung von 168,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Thulium bzw. 173,0 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Ytterbium mit jeweils 0,3 ml ($5 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure hergestellt worden. Die Gemische wurden jeweils 11 Tage bei 130°C erhitzt. Die Verbindungen kristallisieren in Form von farblosen Nadeln.

Kristalle der Verbindungen SE(OAc)₃ (SE = Tm, Yb) gehören dem orthorhombischen Kristallsystem an. Sie kristallisieren im Fall von Tm(OAc)₃ in der Raumgruppe Ccm2₁ (Nr. 36) mit $a = 828,1(1)$, $b = 1397,74(5)$, $c = 831,5(4)$ pm, $V = 962,5(2) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0176$ [$I > 2\sigma(I)$]. Im Fall von Yb(OAc)₃ kristallisieren sie in der Raumgruppe Cmc2₁ (Nr. 36) mit $a = 1387,8(2)$, $b = 829,3(2)$, $c = 822,4(9)$ pm, $V = 946,5(3) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0237$ [$I > 2\sigma(I)$]. Die beiden Verbindungen sind isotyp zum Luthetiumacetat Lu(OAc)₃ und waren bisher nur aus Pulverdaten bekannt. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 6 zusammengefasst.

Tabelle 6. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von SE(OAc)₃ mit SE = Yb, Tm.

	Tm(OAc) ₃	Yb(OAc) ₃
Summenformel	C ₆ H ₉ O ₆ Tm	C ₆ H ₉ O ₆ Yb
Molmasse [g·mol ⁻¹]	346,06	350,17
<i>Messdaten</i>		
Diffraktometer		IPDS I
Strahlung		Mo-K _α
Temperatur (K)		293(2)
Belichtungszeit (min)		5
Detektorabstand (mm)		60
2θ-Bereich (°)		3.8 - 56.3
Indexbereich	-10 ≤ h ≤ 10 -18 ≤ k ≤ 18 -9 ≤ l ≤ 9	-18 ≤ h ≤ 18 -10 ≤ k ≤ 10 -9 ≤ l ≤ 9
Scan-Modus		0° ≤ φ ≤ 200°
Inkrement		Δφ = 2°
Anzahl der Bilder		100
Anzahl gemessener Reflexe	4476	4438
Anzahl unabhängiger Reflexe	1114	1107
Anzahl beobachteter Reflexe	1044	987
Absorptionskorrektur	numerisch	
Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	9,214	9,876
Transmission T _{min} /T _{max}	0,2749/0,3520	
<i>Kristallographische Daten</i>		
Kristallgröße (mm ³)		0,5·0,1·0,1
Kristallform		Nadel
Kristallsystem		orthorhombisch
Raumgruppe	Ccm21 (Nr. 36)	Cmc2 ₁ (Nr. 36)
a (pm)	828,1(1)	1387,8(2)
b (pm)	1397,7(5)	829,3(2)
c (pm)	831,5(4)	822,4(1)
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	962,5(2)	946,5(3)
Formeleinheiten Z	4	
Dichte ρ _{calc} (g·cm ⁻³)	2,388	2,457
F(000)	648	652
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>		
Strukturverfeinerung		SHELXL-97
Zahl der Variablen		69
Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-0,612/ 0,540	-1,112/0,685
Gütefaktoren (I>2σ(I))	R ₁ = 0,0176 wR ₂ = 0,0371	R ₁ = 0,0237 wR ₂ = 0,0457
Gütefaktoren (alle)	R ₁ = 0,0204 wR ₂ = 0,0376	R ₁ = 0,0306 wR ₂ = 0,0468
Goodness of fit	1,120	1,011
Wichtungsparameter a/b	0,0201/0	0,0198/0
CCDC-Nummer	653314	653308

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Die Kristallstruktur besteht aus identischen Ketten, die entlang [001] verlaufen. Sie beinhaltet nur eine röntgenographische Metallatomlage, in der zwei siebenfach koordinierte Metallatome über ein $3\Delta, \mu_1$ - und zwei $2\Delta, \mu_2$ -Acetatanionen verknüpft werden. Das Verknüpfungsmuster rotiert pro Bindung um 180° entlang der Kette (Abb. 29).

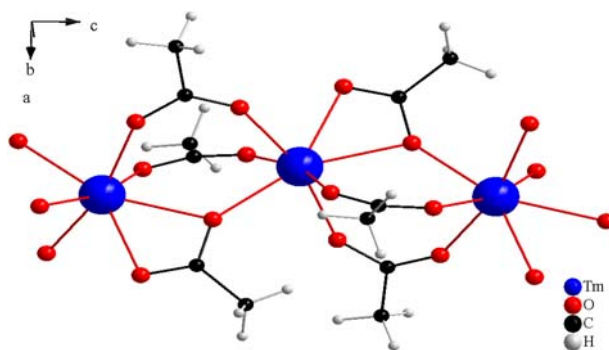


Abb. 29 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Tm in $\text{Tm}(\text{OAc})_3$.

Die Metall–O–Abstände liegen in $\text{Tm}(\text{OAc})_3$ im Bereich zwischen 222,3(4) und 234,6(6) pm mit einem Mittelwert von 228,5 pm und in $\text{Yb}(\text{OAc})_3$ zwischen 218,8(5) und 232,9(1) pm mit einem Mittelwert von 228,6 pm. Der Tm–Tm–Abstand beträgt 423,2(1) pm und der Yb–Yb–Abstand 420,3(1) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 7 zusammengefasst.

Tabelle 7. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $\text{SE}(\text{OAc})_3$ mit SE = Yb, Tm.

2xTm	O2	222,3(4)	2xYb	O2	218,8(5)
2xTm	O6	222,6(4)	2xYb	O3	219,8(6)
2xTm	O3	231,4(5)	2xYb	O1	228,1(7)
Tm	O7	234,6(6)	Yb	O4	232,9(1)
<Tm	O>	228,5	<Yb	O>	228,6
Tm	Tm	423,2(1)	Yb	Yb	420,3(1)

Die Ketten verlaufen parallel zueinander und sind leicht gewellt mit $\varphi_{(\text{Tm}, \text{Tm}, \text{Tm})} = 158,4(8)^\circ$ (Abb. 30) und $\varphi_{(\text{Yb}, \text{Yb}, \text{Yb})} = 156,1(2)^\circ$.

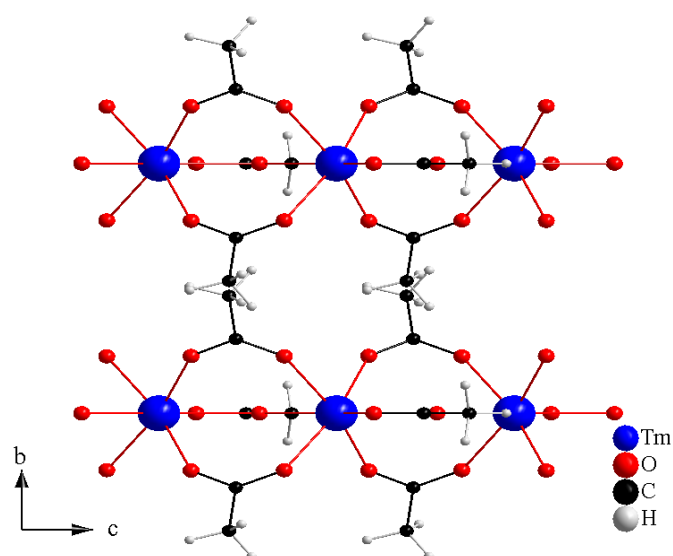


Abb. 30 : Perspektivische Darstellung von übereinander liegenden Ketten in $\text{Tm}(\text{OAc})_3$.

Sie sind so angeordnet, dass jede Kette hexagonal von sechs weiteren umgeben ist (Abb. 31).

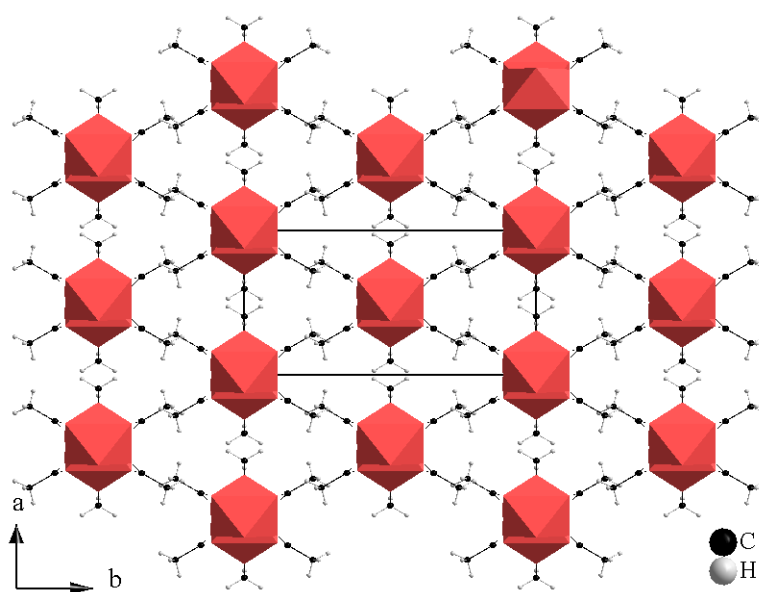


Abb. 31 : Perspektivische Darstellung der hexagonalen Stabpackung entlang $[001]$ in $\text{Tm}(\text{OAc})_3$.

4.1.4.2 Pulverdiffraktogramme

Die Pulverdiffraktogramme von $\text{SE}(\text{OAc})_3$ ($\text{SE} = \text{Tm}, \text{Yb}$) wurden zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde jeweils das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 32 gegenübergestellt. Die erhaltenen Produkte sehen phasenrein aus.

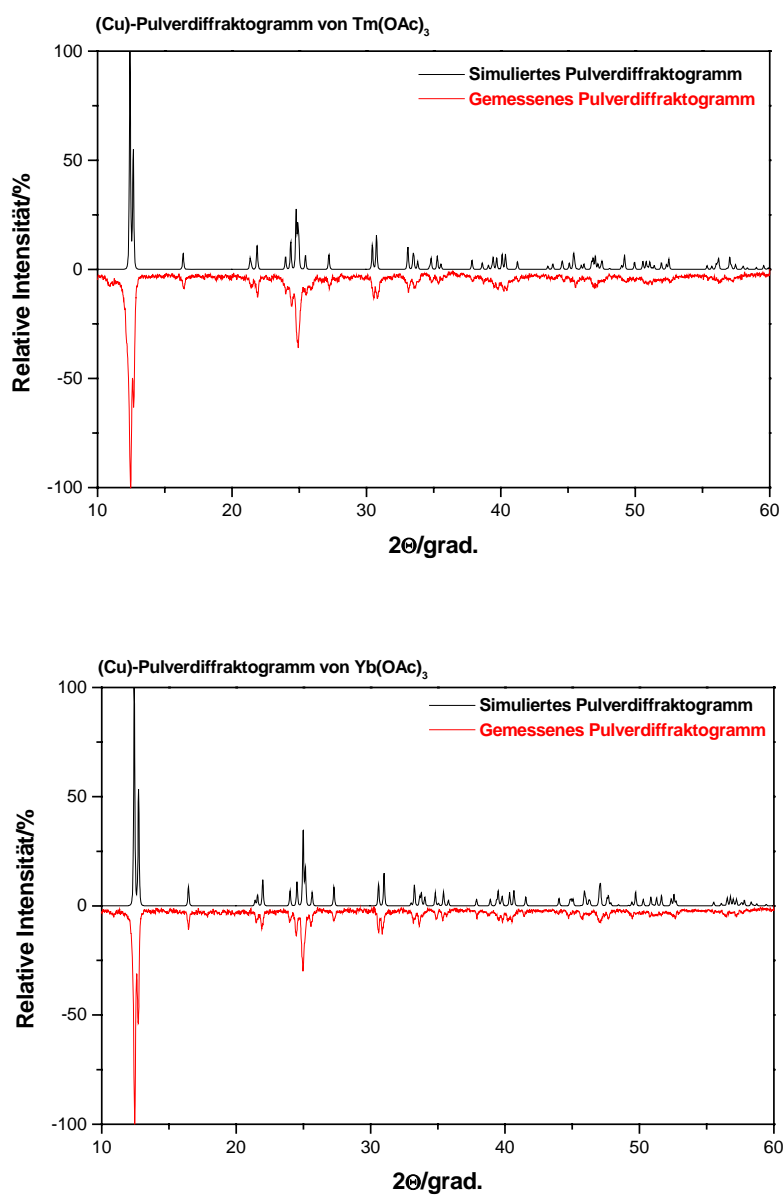


Abb. 32 : Pulverdiffraktogramme von $\text{SE}(\text{OAc})_3$ ($\text{SE} = \text{Tm}$ (oben), Yb (unten)).

4.1.5 IR- und Ramanspektrum^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Metallkation näher untersucht werden. Da es sich bei den Verbindungen dieses Kapitels um reine Acetate handelt, sind die zugehörigen Spektren nahezu identisch worden. Es wird daher repräsentativ das IR- und Ramanspektrum von $\text{Tm}(\text{OAc})_3$ diskutiert (Abb. 33).

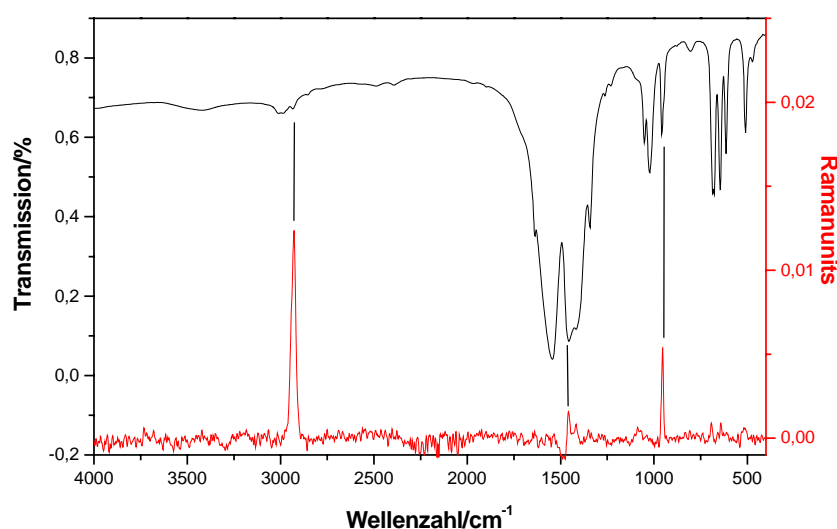


Abb. 33 : IR- und Ramanspektrum von $\text{Tm}(\text{OAc})_3$.

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Acetat zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 8). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden. Die sehr schwache OH-Bande bei ca. 3500 cm^{-1} stammt wohl von Feuchtigkeit aus den Einbettungsmittel KBr.

Tabelle 8. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von Tm(OAc)₃.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	~2987	–
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2933	~2927
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1635	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	~1544	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	~1458	~1456
$\nu(\text{C}-\text{O})$	~1313	–
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1060 – 1010	~952
$\delta(\text{C}-\text{C})$	~800	–
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	670 - 600	–

4.2 Wasserhaltige Seltenerdacetate

4.2.1 Einleitung

Die wasserhaltigen Acetate der Seltenerdmetalle sind bereits intensiv untersucht worden. Bekannt sind Verbindungen der allgemeinen Zusammensetzung $\text{SE}(\text{OAc})_3 \cdot (\text{H}_2\text{O})_x$ mit $x = 0,5; 1; 1,5; 2; 3; 4$, wobei die niederen Hydrate meist von den früheren Seltenerdmetallen gebildet werden. Sie sind meist aus wässrigen oder essigsauren Lösungen eines Salzes des zugehörigen Seltenerdmetalls durch langsames Eindampfen hergestellt worden.

$\text{Y}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ kristallisiert monoklin in der Raumgruppe Cc [8]. Die Kristallstruktur besteht aus Ketten mit zwei röntgenographisch unterschiedlichen Yttriumlagen. An einer Yttriumlage koordiniert das Wassermolekül, so dass ein Yttriumatom neunfach und das zweite achtfach koordiniert ist. Die Metallatome werden über eine $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt. Der mittlere Y–O–Abstand beträgt 238,8 pm.

$\text{Pr}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})$ kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $\text{P}2_1/\text{c}$ [9]. Die Struktur ist aus Ketten aufgebaut, die entlang [001] verlaufen. Sie enthält eine neunfach koordinierte Praseodymlage, acht Sauerstoffatome aus zwei $2\Delta, \mu_2$ - und vier $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen und einem Wassermolekül. Die Ketten sind leicht gewellt und zueinander versetzt, so dass die Wassermoleküle einer Kette mit jenen der benachbarten Kette wechselwirken können. Der mittlere Pr–O–Abstand beträgt 249,7 pm.

Das Acetathydrat $\text{Pr}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $\text{P}\bar{1}$ [10]. Die Kristallstruktur enthält ${}^1[\text{Pr}(\text{CH}_3\text{COO})_2(\text{H}_2\text{O})]^+$ -Ketten, die entlang [100] verlaufen und mit ${}^0\left([\text{Pr}(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{H}_2\text{O})]^- \right)_2$ -Dimeren über gemeinsame Sauerstoffatome der verbrückenden Acetatanionen zu Schichten parallel [010] verknüpft werden. Das dritte Wassermolekül liegt als Kristallwasser zwischen den Schichten und stabilisiert die Struktur über Wasserstoffbrückenbindungen. Die Verbindung enthält zwei röntgenographisch unterschiedliche Praseodymlagen, zehnfach und neunfach koordiniert. Der mittlere Pr–O–Abstand beträgt 255,5 pm.

Die Verbindung $\text{Y}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2$ kristallisiert triklin in der Raumgruppe $P\bar{1}$ [8]. Die Struktur ist aus Dimeren aufgebaut, mit einer neunfach koordinierten Yttriumlage. Die Yttriumatome werden über zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt, sie tragen jeweils noch zwei 2Δ -Acetatanionen und zwei Wassermoleküle. Die Struktur wird über Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den Dimeren stabilisiert. Der mittlere Y–O–Abstand beträgt 239,6 pm.

Das Acetathydrat $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_3$ kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $P2_1/c$ [9]. Die Kristallstruktur ist analog zur der in $\text{Y}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2$ aus Dimeren aufgebaut, in denen das Europiumatom neunfach koordiniert wird. Zwei Wassermoleküle sind direkt am Metallatom koordiniert, während das dritte als Kristallwasser zwischen den Dimeren durch Wasserstoffbrücken als zusätzliche Stabilisierung wirkt. Der mittlere Eu–O–Abstand beträgt 259,7 pm.

Das Tetrahydrat $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_4$ kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $P\bar{1}$ [2]. Die Struktur besteht wie in $\text{Y}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2$ und $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_3$ aus Dimeren mit neunfach koordinierten Metallatom, aus zwei verbrückenden $3\Delta, \mu_1$ -, zwei 2Δ -Acetatanionen und zwei Wassermolekülen. Es treten nun zwei Wassermoleküle pro Metallatom als Kristallwasser durch Wasserstoffbrücken als zusätzliche Stabilisierung ein. Der mittlere Dy–O–Abstand beträgt 242,1 pm.

Im Rahmen dieser Arbeit konnten im Bereich der Acetathydrate $\text{SE}(\text{OAc})_3 \cdot (\text{H}_2\text{O})_x$ mit $x = 0,5$ die Verbindungen mit $\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Er}$, sowie mit $x = 1,5$ die Europiumverbindung beigelegt werden.

4.2.2 Neodym-, Samarium- und Erbiumacetathydrate, $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$

4.2.2.1 Synthese und Kristallstrukturen

Die Acetatehydrate von Neodym, Samarium und Erbium, $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ (SE = Nd, Sm, Er), wurden auf unterschiedliche Weise hergestellt. Das Neodym- und Samariumacetat wurden aus einem Gemisch von 144,2 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Neodym bzw. 150,3 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Samarium und jeweils 0,11 ml ($2 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure erhalten. Die Gemische wurden 11 Tage bei 130°C erhitzt. Das Erbiumacetat wurde aus der Umsetzung von 83,7 mg ($0,5 \cdot 10^{-3}$ mol) mit 156,2 mg ($1,5 \cdot 10^{-3}$ mol) Malonsäure erhalten. Wie bereits im Abschnitt 3.2.2 erwähnt, ist dabei die Malonsäure unter Decarboxylierung zur Essigsäure zerfallen. Das Gemisch wurde zunächst 5 Tage bei 160°C erhitzt und einer Temperung von 2 Tagen bei 130°C und von 2 Tagen bei 110°C ausgesetzt. Die Neodym- und Erbiumacetate kristallisieren in Form von rosa, das Samariumacetat in Form von farblosen Nadeln.

Die Koordinationspolymere $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ (SE = Nd, Sm, Er) kristallisieren monoklin in der Raumgruppe Cc (Nr. 9), für $\text{Nd}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ mit $a = 1620,7(2)$, $b = 1711,8(2)$, $c = 861,7(2)$ pm, $\beta = 119,2(2)^\circ$, $V = 2086,5(4) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0214$ [$I > 2\sigma(I)$], für $\text{Sm}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ mit $a = 1611,2(3)$, $b = 1705,7(1)$, $c = 860,9(9)$ pm, $\beta = 118,6(4)^\circ$, $V = 2076,7(3) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0285$ [$I > 2\sigma(I)$] und für $\text{Er}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})$ mit $a = 1587,7(3)$, $b = 1650,3(8)$, $c = 838,0(5)$ pm, $\beta = 115,9(8)^\circ$, $V = 1974,0(2) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0272$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 9 zusammengestellt.

Tabelle 9. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von SE(OAc)₃(H₂O)_{0,5} mit SE = Nd, Sm, Er.

	Nd(OAc) ₃ (H ₂ O) _{0,5} (1)	Sm(OAc) ₃ (H ₂ O) _{0,5} (2)	Er(OAc) ₃ (H ₂ O) _{0,5} (3)
Summenformel	C ₆ H ₉ O _{6,5} Nd	C ₆ H ₉ O _{6,5} Sm	C ₆ H ₁₀ O _{6,5} Er
Molmasse [g·mol ⁻¹]	329,37	335,48	353,40
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer		IPDS II	
Strahlung		Mo-K _α	
Temperatur (K)	170	170	120
Belichtungszeit (min)	5	4	8
Detektorabstand (mm)	120	100	100
2θ-Bereich (°)	1,91 - 54,78	2,29 - 59,53	2,29 - 59,53
Indexbereich	-20 ≤ h ≤ 20	-22 ≤ h ≤ 22	-21 ≤ h ≤ 21
	-21 ≤ k ≤ 21	-23 ≤ k ≤ 23	-22 ≤ k ≤ 22
	-11 ≤ l ≤ 10	-10 ≤ l ≤ 11	-11 ≤ l ≤ 11
Scan-Modus	0° ≤ ω ≤ 152°; ψ = 90°	0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 0°	0° ≤ ω ≤ 346°; ψ = 90°
Inkrement	Δω = 2°	Δω = 2°	Δω = 1°
Anzahl der Bilder	166	180	353
Anzahl gemessener Reflexe	14763	20117	14554
Anzahl unabhängiger Reflexe	4370	5514	5126
Anzahl beobachteter Reflexe	4223	5190	4686
Absorptionskorrektur		numerisch	
Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	4,979	5,657	8,505
Transmission T _{min} /T _{max}	0,1932/0,5479	0,2334/0,5344	0,2224/0,3849
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm ³)		0,3·0,1·0,1	
Kristallform		Nadel	
Kristallsystem		monoklin	
Raumgruppe		Cc (Nr. 9)	
a (pm)	1620,7(2)	1611,2(2)	1587,7(3)
b (pm)	1711,8(2)	1705,7(1)	1650,3(8)
c (pm)	861,7(2)	861,0(1)	838,0(5)
β (°)	119,2(2)	118,6(4)	115,9(8)
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	2086,5(4)	2076,7(3)	1974,0(2)
Formeleinheiten Z		8	
Dichte ρ _{calc} (g·cm ⁻³)	2,097	2,146	2,378
F(000)	1256	1272	1328
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung		SHELXL-97	
Zahl der Variablen	244	248	255
Restelektronendichte (10 ⁶ ·e·pm ⁻³)	-0,732/0,622	-1,001/0,858	-1,269/1,085
Gütefaktoren (I>2σ(I))	R ₁ = 0,0214	R ₁ = 0,0285	R ₁ = 0,0272
	wR ₂ = 0,0543	wR ₂ = 0,0738	wR ₂ = 0,0730
Gütefaktoren (alle)	R ₁ = 0,0227	R ₁ = 0,0312	R ₁ = 0,0342
	wR ₂ = 0,0550	wR ₂ = 0,0762	wR ₂ = 0,1027
Goodness of fit	1,188	1,146	0,920
Wichtungsparameter a/b	0,0350/0	0,0515/0	0,0885/0
CCDC-Nummer	653323	653313	653306

$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

*Die Wassermoleküle in (1) und (2) sind ohne Wasserstoffatome verfeinert worden. Kristalle der Verbindungen (2) und (3) sind racemisch verzwillingt (BASF = 0,57 für (2) und 0,44 für (3)).

Die Verbindungen $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ ($\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Er}$) kristallisieren in einer Kettenstruktur. Die Ketten verlaufen wellenartig entlang $[100]$ mit $\varphi_{(\text{Nd1}, \text{Nd1}, \text{Nd1})} = 124,6(3)^\circ$, $\varphi_{(\text{Sm1}, \text{Sm1}, \text{Sm1})} = 125,1(2)^\circ$ und $\varphi_{(\text{Er1}, \text{Er1}, \text{Er1})} = 129,0(0)^\circ$. Das Wassermolekül ist stets am Metallatom im Minimum und Maximum der Welle lokalisiert (Abb. 34).

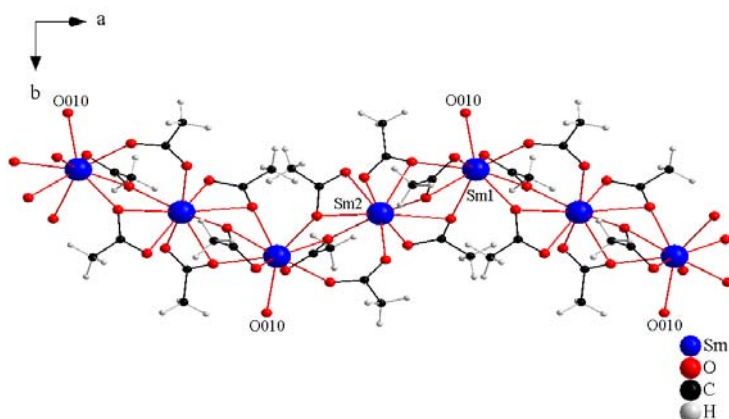


Abb. 34 : Perspektivische Darstellung einer Kette entlang $[001]$ in $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Sie beinhalten zwei röntgenographisch unterschiedliche Metallatome, deren Koordinationssphäre sich im Neodym- und Samariumacetathydrat leicht von der im Erbium- und dem in nächsten Abschnitt beschriebenen Europiumacetathydrat unterscheidet. In der Neodym- und Samariumverbindung werden die Metallatome sowohl durch drei $3\Delta, \mu_1$ - als auch durch ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen abwechselnd verbrückt. Die Metallatome sind beide neunfach koordiniert, wobei das Wassermolekül stets an einer Metallatomlage M1 vorliegt (Abb. 35).

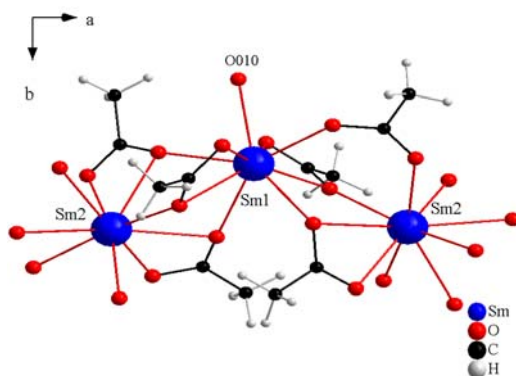


Abb. 35 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Sm^{3+} in $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

In der Erbiumverbindung werden die beiden Erbiumatome stets durch ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ - Acetatanionen verbrückt. Durch das zusätzliche Wassermolekül ist Er1 neunfach und Er2 achtfach koordiniert (Abb. 36).

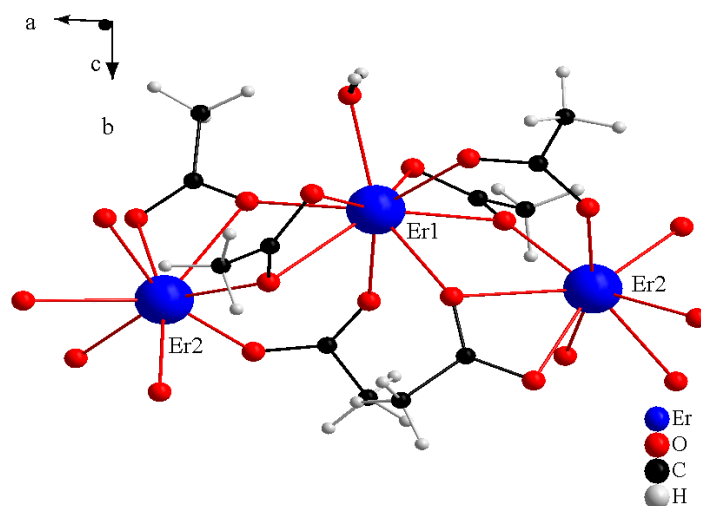


Abb. 36 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Er^{3+} in $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Die Metall–O–Abstände liegen in $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ im Bereich zwischen 235,7(4) und 268,9(4) pm mit einem Mittelwert von 250,0 pm, in $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ zwischen 231,2(5) und 275,2 (6) pm mit einem Mittelwert von 248,0 pm und in $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ im Bereich zwischen 222,5(8) und 258,0(8) pm mit einem Mittelwert von 238,2 pm. Der Nd–Nd–Abstand beträgt 389,7(1) pm, der Sm–Sm–Abstand 388,1(8) pm und der Er–Er–Abstand beträgt 395,8(3) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 10 zusammengefasst.

Tabelle 10. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ mit SE = Nd, Sm, Er.

Nd1	O7	238,6(3)	Sm1	O101	235,6(5)	Er1	O311	231,9(8)	
Nd1	O20	244,0(4)	Sm1	O121	242,4(5)	Er1	O612	232,7(7)	
Nd1	O14	244,2(3)	Sm1	O010	242,8(4)	Er1	O1	234,1(7)	
Nd1	O6	245,5(4)	Sm1	O223	243,2(5)	Er1	O212	236,2(8)	
Nd1	O8	248,3(4)	Sm1	O225	245,4(5)	Er1	O511	237,3(8)	
Nd1	O12	252,7(4)	Sm1	O211	251,2(5)	Er1	O112	241,9(7)	
Nd1	O3	253,6(4)	Sm1	O213	251,4(5)	Er1	O411	244,3(7)	
Nd1	O4	254,8(4)	Sm1	O113	252,4(5)	Er1	O412	246,9(7)	
Nd1	O5	262,5(4)	Sm1	O111	261,1(5)	Er1	O111	255,6(7)	
<Nd1	O>	249,4	<Sm1	O>	247,3	<Er1	O>	240,1	
Nd2	O9	235,7(4)	Sm2	O201	231,2(5)	Er2	O611	222,5(8)	
Nd2	O3	241,4(3)	Sm2	O213	238,1(4)	Er2	O312	224,4(7)	
Nd2	O5	243,5(4)	Sm2	O111	240,2(5)	Er2	O411	229,5(7)	
Nd2	O16	248,9(4)	Sm2	O221	243,3(7)	Er2	O111	233,5(8)	
Nd2	O11	249,0(4)	Sm2	O123	245,6(6)	Er2	O512	236,1(9)	
Nd2	O10	249,5(4)	Sm2	O125	246,5(6)	Er2	O211	238,0(8)	
Nd2	O20	256,0(4)	Sm2	O223	254,6(5)	Er2	O212	247,2(8)	
Nd2	O8	261,9(4)	Sm2	O225	263,5(6)	Er2	O511	258,0(8)	
Nd2	O6	268,9(4)	Sm2	O121	275,2(6)				
<Nd2	O>	250,5	<Sm2	O>	248,7	<Er2	O>	236,2	
Nd1	Nd2	389,7(1)	Sm1	Sm2	388,1(8)	Er1	Er2	395,8(3)	
							O1H1	O112	205,1(0)
							O1H1	O412	199,1(0)

Zu erwarten wäre, dass mit abnehmendem Radius des Seltenerdmetalls der Metall–Metall–Abstand bei gleichem Verknüpfungsmuster abnimmt. In der Erbiumverbindung ist er jedoch deutlich größer, begründet auf das Einbringen einer flexibleren und sterisch weniger anspruchsvollen $2\Delta, \mu_2$ -Einheit.

Die Anordnung der Ketten entspricht einer hexagonalen Stabpackung. Eine direkte Wechselwirkung zwischen den Wassermolekülen von übereinander liegenden Ketten tritt durch die dazwischen liegenden aliphatischen Reste nicht auf (Abb. 39).

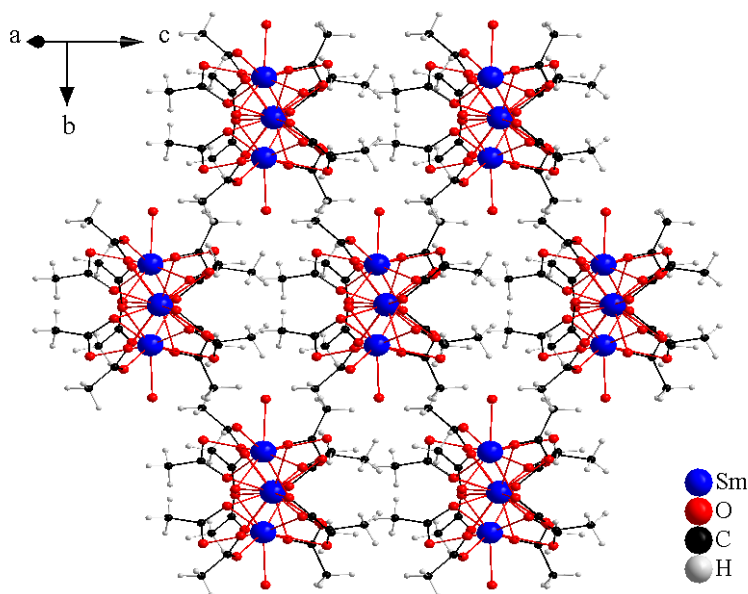


Abb. 39 : Perspektivische Darstellung der hexagonalen Stabpackung in $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$.

4.2.2.2 Pulverdiffraktogramme

Die Pulverdiffraktogramme von $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ ($\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Er}$) wurden zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde jeweils das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 40 gegenübergestellt. Die gemessenen Diffraktogramme für die Verbindungen $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ ($\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}$) weisen einen deutlichen Untergrund vor allem für $\text{SE} = \text{Sm}$ auf, womit eine Verunreinigung nicht auszuschließen ist. Welche Verunreinigung vorliegt ist nicht bekannt. Eventuell hat sich das Acetathydrat bei der Präparation der Probe zum wasserfreien Acetat teilweise umgesetzt.

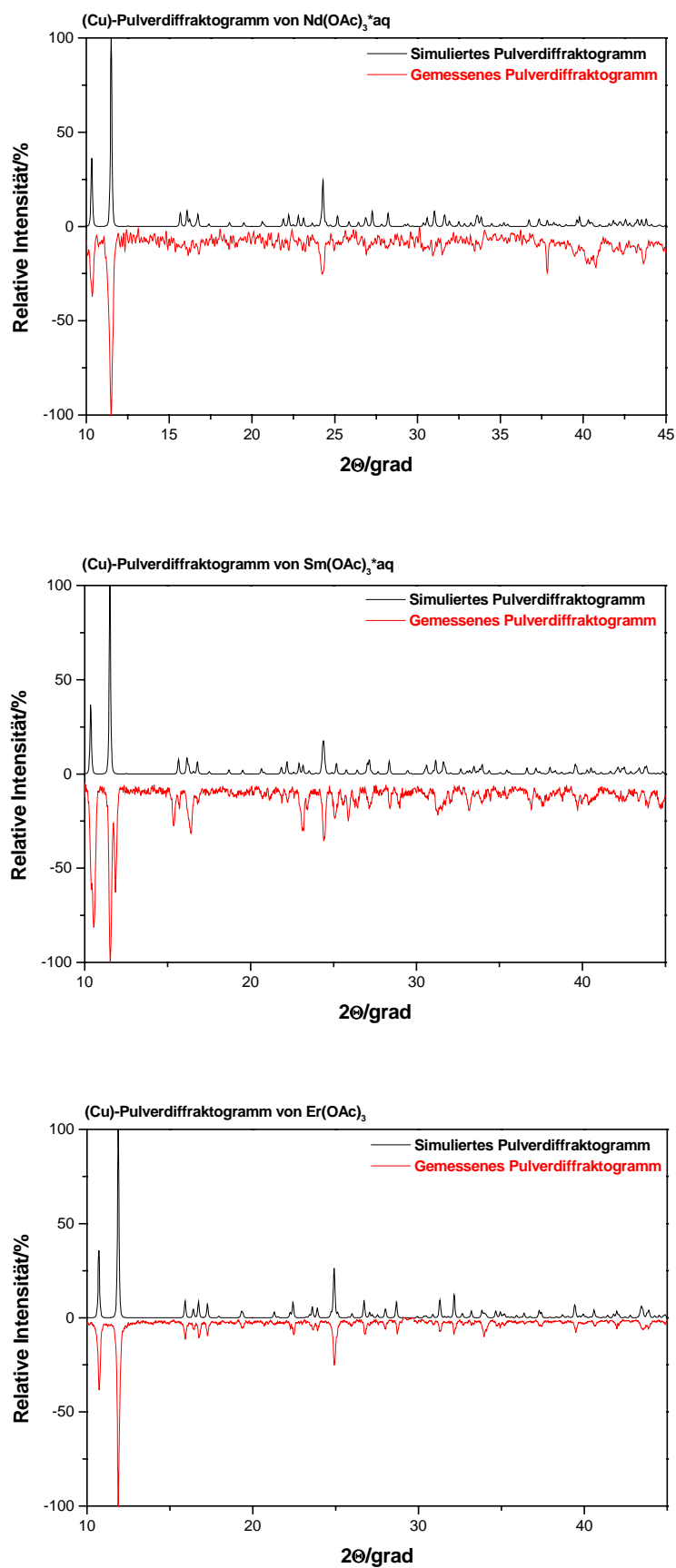


Abb. 40 : Pulverdiffraktogramme von $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ (SE = Nd (oben), Sm (mitte), Er (unten)).

4.2.3 Europiumacetathydrat^[7], $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$

4.2.3.1 Synthese und Kristallstrukturen

Das Europiumacetat $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$ mit höherem Wassergehalt ist aus der Umsetzung von 151,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Europium mit 0,3 ml ($5 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure hergestellt worden. Das Gemisch wurde 9 Tage bei 130°C erhitzt. Die Verbindung kristallisiert in Form von farblosen Nadeln.

Kristalle der Verbindung $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$ kristallisieren monoklin in der Raumgruppe Cc (Nr. 9), mit $a = 1608,7(2)$, $b = 1665,6(2)$, $c = 839,1(9)$ pm, $\beta = 115,7(6)^\circ$, $V = 2025,2(4) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0424$ [$I > 2\sigma$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind der Tabelle 11 zu entnehmen.

$[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$ kristallisiert analog zu den bereits erwähnten Acetathydraten $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ mit $\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Er}$ in einer Kettenstruktur. Die beiden röntgenographisch unterschiedlichen Europiumlagen sind wie in $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ acht- und neunfach koordiniert und von einem $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt (Abb. 41).

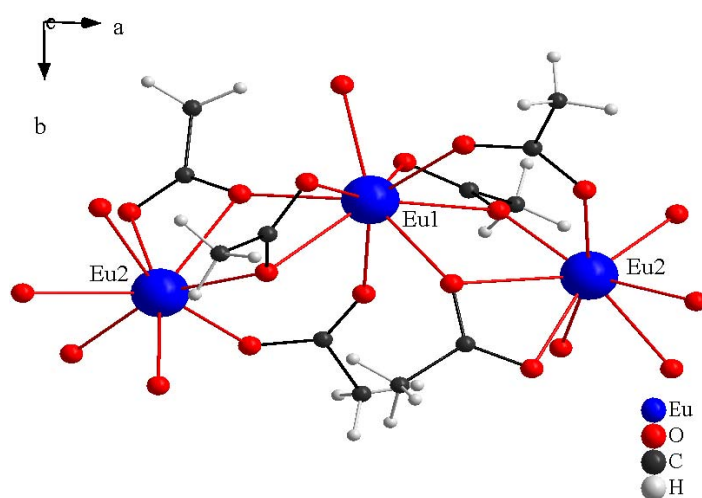


Abb. 41 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Eu^{3+} in $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$.

Tabelle 11. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$.

Summenformel	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_{7,5}\text{Eu}$	Molmasse $[\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}]$	356,12
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	5
Strahlung	Mo-K_α	Detektorabstand (mm)	100
Temperatur (K)	170	2θ -Bereich ($^\circ$)	2,29 - 59,53
Indexbereich	$-22 \leq h \leq 18$	Anzahl gemessener Reflexe	15915
	$-23 \leq k \leq 23$	Anzahl unabhängiger Reflexe	5047
	$-11 \leq l \leq 11$	Anzahl beobachteter Reflexe	4407
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 134^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	6,210
Anzahl der Bilder	157	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,3453/0,4643
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,5·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	Cc (Nr. 9)
a (pm)	1608,7(2)	β ($^\circ$)	115,7(6)
b (pm)	1665,6(2)		
c (pm)	839,1(9)		
Zellvolumen ($10^6\cdot\text{pm}^3$)	2025,2(4)	Formeleinheiten Z	8
Dichte ρ_{calc} ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)	2,336	F(000)	1368
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	260
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0424$	Restelektronendichte ($10^6\text{e}\cdot\text{pm}^{-3}$)	-0,932/1,677
	$wR_2 = 0,1015$	Goodness of fit	1,024
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0521$	Wichtungsparameter a/b	0,0757/0
	$wR_2 = 0,1096$	CCDC-Nummer	601934

$R_1 = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

*Die Wassermoleküle sind ohne Wasserstoffatome verfeinert worden. Kristalle von $[\text{Eu}_2(\text{OAc})_6(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})_2$ sind racemisch verzwilligt (BASF = 0,65).

Die Eu–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 229,6(8) und 259,9(8) pm mit einem Mittelwert von 243,7 pm. Der Eu–Eu–Abstand beträgt 401,6(0) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 12 zusammengefasst.

Tabelle 12. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$.

Eu1	O225	236,4(8)	Eu2	O201	229,6(8)
Eu1	O101	237,4(7)	Eu2	O125	232,3(8)
Eu1	O010	239,3(7)	Eu2	O213	233,7(8)
Eu1	O223	242,1(8)	Eu2	O111	239,8(8)
Eu1	O121	242,2(8)	Eu2	O123	244,0(8)
Eu1	O211	247,6(7)	Eu2	O221	244,8(8)
Eu1	O213	250,0(8)	Eu2	O223	251,6(8)
Eu1	O113	252,2(8)	Eu2	O121	256,9(9)
Eu1	O111	259,9(8)			
<Eu1 O>			<Eu2 O>		
245,9			241,5		
Eu1	Eu2	401,6(1)			

Die Ketten verlaufen wellenartig entlang [100] mit $\varphi_{(\text{Eu1}, \text{Eu1}, \text{Eu1})} = 129,1(8)^\circ$, wobei sich auch hier das Maximum einer Kette dem Minimum der benachbarten Kette gegenüberliegt und umgekehrt. Diese Anordnung von übereinander liegenden Ketten ist begründet auf das Ausbilden von Wasserstoffbrücken. In dieser Verbindung füllen zwei freie Wassermoleküle O011 und O012 als Kristallwasser weiteren Platz in der Struktur auf. Das Vorliegen von eventuellen Wasserstoffbrücken konnte nicht überprüft werden, da die Sauerstoffatome O011 und O012 ohne Wasserstoffatome verfeinert wurden (Abb. 42).

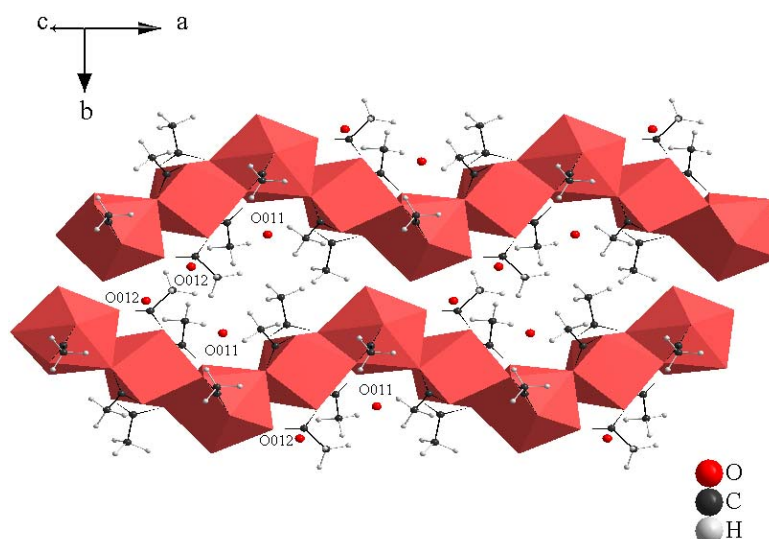


Abb. 42 : Polyedrische Darstellung von übereinander liegenden Ketten in $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0.5}](\text{H}_2\text{O})$.

Die Aufstellung der Ketten entspricht einer hexagonalen Anordnung um jeden Strang (Abb. 43).

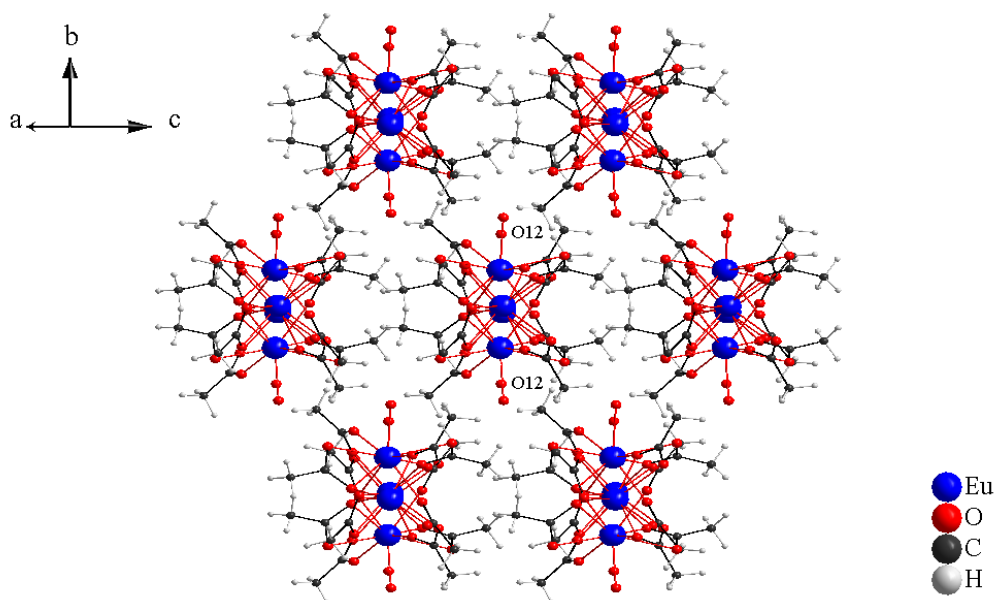


Abb. 43 : Perspektivische Darstellung der hexagonalen Stabpackung in $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0.5}](\text{H}_2\text{O})$.

4.2.3.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 44 gegenübergestellt. Die erhaltenen Produkte sehen phasenrein aus.

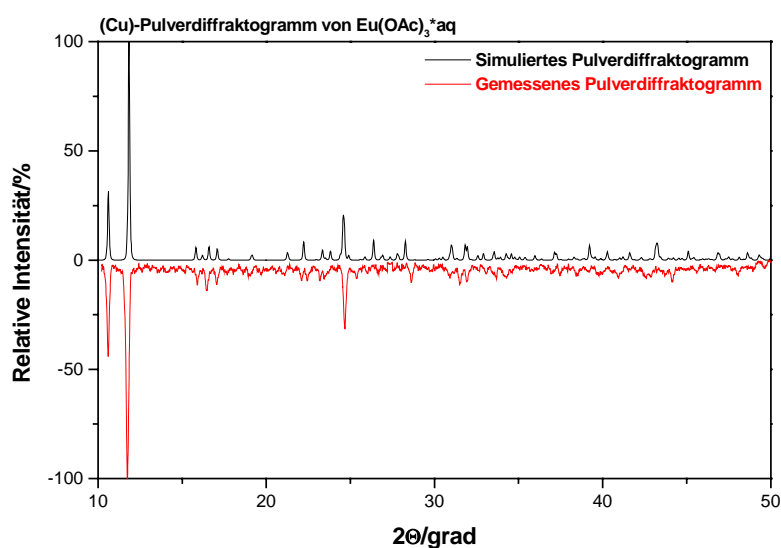


Abb. 44 : Pulverdiffraktogramm von $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$.

4.2.4 IR- und Ramanspektren^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Metallkation näher untersucht werden. Da es sich bei den Verbindungen dieses Kapitels um Acetathydrate handelt mit geringfügig unterschiedlichem Wassergehalt, werden repräsentativ die IR- und Ramanspektren von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ und von $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$ diskutiert (Abb. 45).

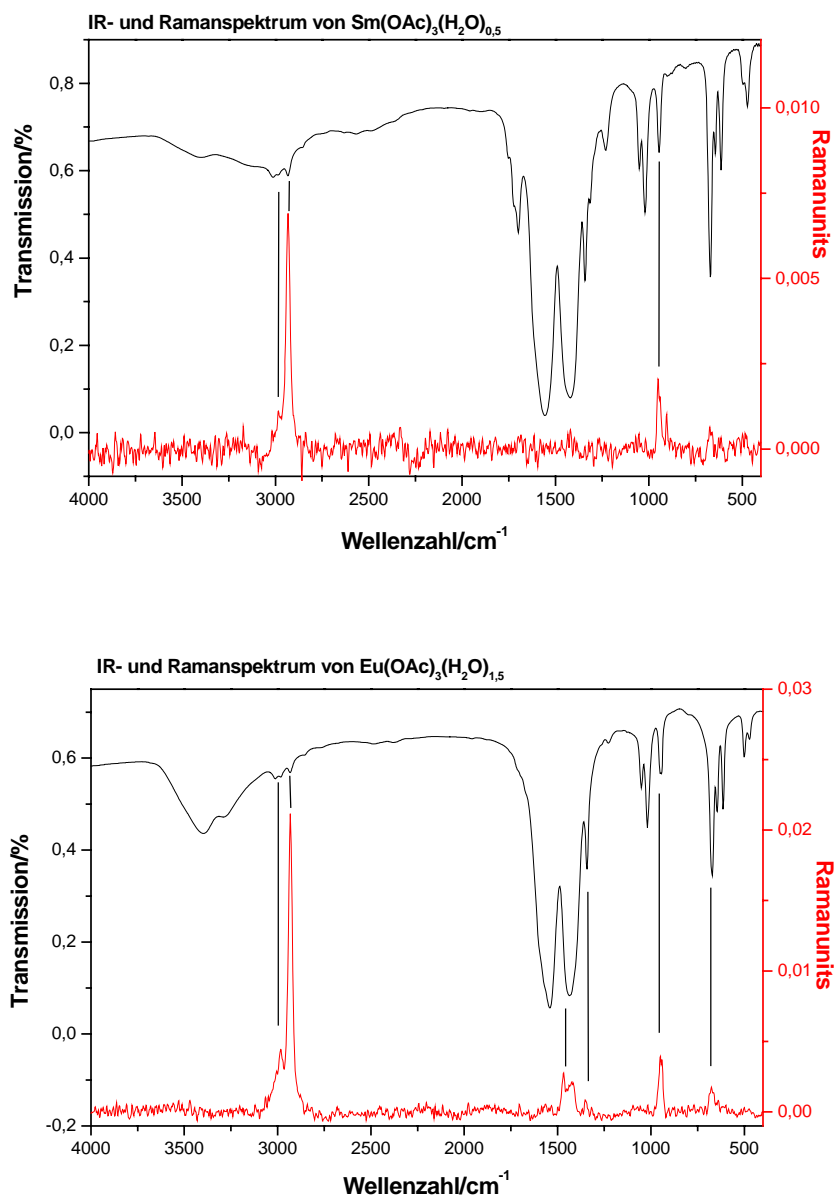


Abb. 45 : IR- und Ramanspektren von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ (oben) und $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$ (unten).

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Acetathydrat zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 13, 14). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden. Beim Vergleich der beiden Spektren, insbesondere der (OH)–Schwingungsbanden, wird der unterschiedliche Wassergehalt und die daraus gebildeten zusätzlichen Wasserstoffbrücken durch die Breite und Tiefe der Bande zum Ausdruck gebracht.

Tabelle 13. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3635 – 3080	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	~3000	–
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2933	~2931
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1701	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	~1552	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	~1423	~1456
$\nu(\text{C}-\text{O})$	~1340	–
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1051 – 940	~949
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	671 – 472	–

Tabelle 14. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $[\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}](\text{H}_2\text{O})$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3621 – 3060	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	~3006	2983
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2931	~2931
$\nu(\text{C}=\text{O})$	–	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	~1540	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	~1432	1465 – 1421
$\nu(\text{C}-\text{O})$	~1342	1350
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1053 – 921	~949
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	671 – 495	677

4.3 Essigsäurehaltige Seltenerdacetate

4.3.1 Einleitung

Im Bereich der Seltenerdcarboxylate sind einige Acetat-Essigsäure-Addukte bekannt. Es handelt sich bei diesen Verbindungen um Acetate mit eingelagerten Wasser- und Essigsäuremolekülen, wobei sie sowohl als Liganden als auch als freie Moleküle in die Struktur eingebaut sein können.

Die Verbindungen $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})$ (1) mit $\text{SE} = \text{Nd, Sm} - \text{Gd, Ho}$ und $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})$ (2) und $\text{SE} = \text{Y, Gd} - \text{Lu}$ konnten aus einer Ammoniumacetatschmelze des zugehörigen Seltenerdmetalloxids in einer evakuierten Glasampulle bei 140°C erhalten werden [12]. Die zu (2) polymorphe (andere Modifikation) Samariumverbindung $[\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})$ wurde durch langsames Eindampfen einer essigsäuren Lösung von Samariumhydroxid erhalten [13]. (1) kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $\text{P2}_1/\text{n}$. Die Struktur besteht aus dimeren Baueinheiten mit neunfach koordinierten Metallatomen. Die Metallatome werden über zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt, wobei zusätzlich noch zwei 2Δ -Acetatanionen, ein Wasser- und ein Essigsäuremolekül an jedes Atom koordiniert sind. (2) kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $\text{P}\bar{1}$. Die Struktur besteht ebenfalls aus dimeren Baueinheiten mit zwei röntgenographisch unterschiedlichen Metallatomen, beide neunfach koordiniert. Die Metallumgebung ist analog zu (1), wobei das koordinierende Essigsäuremolekül in (1) durch ein zweites Wassermolekül ersetzt wird. Zwischen den Dimeren ist zusätzlich ein Essigsäuremolekül eingelagert. Die zu (2) polymorphe Samariumverbindung $[\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_2](\text{HOAc})$ kristallisiert in der rhomboedrischen Raumgruppe $\text{R}\bar{3}$. Sie besteht ebenfalls aus dimeren Baueinheiten mit neunfach koordinierten Samariumatomen. Die Metallatome sind durch zwei $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt, wobei zusätzlich eine 2Δ -Acetateinheit und zwei Wassermoleküle an jedes Metallatom koordinieren. Der mittlere $\text{Sm}-\text{O}$ -Abstand beträgt 248 pm. Zwischen den Dimeren ist zusätzlich ein Essigsäuremolekül eingelagert.

Im Rahmen meiner Diplomarbeit konnte ich die Verbindungen $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2](\text{HOAc})_2$ (3) mit $\text{SE} = \text{Pr}, \text{Nd}$ und $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})(\text{H}_2\text{O})] \cdot (\text{HOAc})_2$ (4) mit $\text{SE} = \text{Eu}, \text{Er}$ durch die direkte Umsetzung des jeweiligen Seltenerdmetalls mit überschüssigem Eisessig herstellen [14, 15]. (3) kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $\bar{P}1$. Die Struktur besteht aus Acetat-verbrückten Ketten, die entlang [100] verlaufen und eine zehnfach koordinierte Metalllage enthalten. Die Metallatome sind entlang [100] über zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt, zusätzlich koordinieren senkrecht dazu eine 2Δ -Acetateinheit und gegenüber zwei Essigsäuremoleküle an jedes Metallatom. Die Koordination dieser beiden nicht verbrückenden Liganden ist zwischen benachbarten Metallatomen um 180° um [100] zueinander gedreht. Die Ketten sind leicht zueinander versetzt, so dass sich die aliphatischen Reste zwischen den Ketten ausreichend voneinander entfernen können unter Bildung einer dichten Packung. Zwischen den Ketten sind zusätzlich zwei Essigsäuremoleküle pro Metallatom eingelagert. (4) kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $P2_1/a$. Die Struktur besteht wie bei den bereits erwähnten Verbindungen (1) und (2) aus Dimeren, die eine neunfach koordinierte Metalllage beinhalten und zwischen denen noch Essigsäuremoleküle eingelagert sind. Die Metallatome werden über zwei $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen verbrückt, wobei zusätzlich noch ein Wasser-, ein Essigsäuremolekül und eine 2Δ -Acetateinheit an jedes Metallatom koordinieren.

Alle in diesem Kapitel erwähnten und beschriebenen Verbindungen sind zusätzlich durch Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den koordinierenden Wasser- und/oder Essigsäuremolekülen sowie freien Essigsäuremolekülen stabilisiert.

Im Rahmen dieser Arbeit konnten drei weitere Acetat-Essigsäure-Addukte hergestellt werden. Mit der Verbindung $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$ kann gefolgert werden, dass die früheren und größeren Seltenerdmetalle bevorzugt die Zusammensetzung $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2](\text{HOAc})_2$, während die späteren und kleineren Seltenerdmetalle bevorzugt die Zusammensetzung $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})(\text{H}_2\text{O})](\text{HOAc})_2$ bilden. Der Ersatz eines Essigsäuremoleküls gegen ein Wassermolekül in der Koordinationssphäre des Metallatoms wird bei den kleineren Seltenerdmetallen durch den geringeren Platzbedarf begünstigt. Mit den Verbindungen $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ ($\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}$) konnte eine weitere Struktur den Acetat-Essigsäure-Addukten beigelegt werden.

4.3.2 Neodym- und Samariumacetatsolvat, $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2$

4.3.2.1 Synthese und Kristallstrukturen

Die isotypen Acetate von Neodym und Samarium $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ ($\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}$) wurden auf unterschiedliche Weise hergestellt. Die Neodymverbindung $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ konnte aus einem Acetat-Essigsäure-Addukt mit höherem Essigsäuregehalt $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2](\text{HOAc})_2$ durch langsames Abdampfen der Essigsäure in einer Schlenkvorrichtung mit Seitenhahn erhalten werden. Bei dem ursprünglichen Acetat $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2](\text{HOAc})_2$ handelt es sich um eine Verbindung, die im Rahmen der Diplomarbeit hergestellt wurde. Damals sind 144,2 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Neodym und 0,5 ml ($8 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure bei 130°C für 11 Tage miteinander umgesetzt worden. Beide Neodymacetate bilden rosa, nadelförmige Kristalle. Das Samariumacetat konnte bei der Umsetzung von 150,4 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Samarium und 0,6 ml ($10 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure erhalten werden. Das Gemisch wurde zunächst 5 Tage bei 160°C erhitzt und einen Tag lang bei 100°C getempert. Die Verbindung kristallisiert in Form von farblosen Nadeln.

$[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ ($\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}$) kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $\bar{P}1$ (Nr. 2) mit den Kristallparametern $a = 770,6(1)$, $b = 954,2(6)$, $c = 1169,9(2)$ pm, $\alpha = 103,2(9)$, $\beta = 104,7(5)$, $\gamma = 101,3(9)^\circ$, $V = 779,1(2) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0338$ [$I > 2\sigma(I)$] für $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ und $a = 753,4(1)$, $b = 915,5(1)$, $c = 1194,7(2)$ pm, $\alpha = 88,6(3)$, $\beta = 74,3(1)$, $\gamma = 89,1(7)^\circ$, $V = 793,0(2) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0373$ [$I > 2\sigma(I)$] für $[\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 15 zusammengefasst.

Tabelle 15. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von [SE(OAc)₃(HOAc)](HOAc) mit SE = Nd, Sm.

	[Nd(OAc) ₃ (HOAc)](HOAc)	[Sm(OAc) ₃ (HOAc)](HOAc)
Summenformel	C ₁₀ H ₁₇ O ₁₀ Nd	C ₁₀ H ₁₇ O ₁₀ Sm
Molmasse [g·mol ⁻¹]	441,48	447,59
<i>Messdaten</i>		
Diffraktometer	IPDS I	IPDS II
Strahlung	Mo-K _α	Mo-K _α
Temperatur (K)	293(2)	170
Belichtungszeit (min)	5	12
Detektorabstand (mm)	60	120
2θ-Bereich (°)	3,8 - 56,3	1,91 - 54,78
Indexbereich	-9 ≤ h ≤ 9 -12 ≤ k ≤ 12 -15 ≤ l ≤ 15	-9 ≤ h ≤ 9 -11 ≤ k ≤ 11 -15 ≤ l ≤ 15
Scan-Modus	0° ≤ φ ≤ 200°	0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 0° 0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 90°
Inkrement	Δφ = 2°	Δω = 2°
Anzahl der Bilder	100	180
Anzahl gemessener Reflexe	9300	12575
Anzahl unabhängiger Reflexe	3450	3513
Anzahl beobachteter Reflexe	3126	2639
Absorptionskorrektur		numerisch
Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	9,214	3,745
Transmission T _{min} /T _{max}	0,4908/0,6958	0,2977/0,6904
<i>Kristallographische Daten</i>		
Kristallgröße (mm ³)		0,5·0,1·0,1
Kristallform		Nadel
Kristallsystem		triklin
Raumgruppe		P $\bar{1}$ (Nr. 2)
a (pm)	770,6(1)	753,4(1)
b (pm)	954,2(6)	915,5(1)
c (pm)	1169,9(2)	1194,7(2)
α (°)	103,2(9)	88,6(3)
β (°)	104,7(5)	74,2(9)
γ (°)	101,3(9)	89,1(7)
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	779,1(2)	793,0(2)
Formeleinheiten Z	2	2
Dichte ρ _{calc} (g·cm ⁻³)	1,882	1,874
F(000)	434	438
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>		
Strukturverfeinerung		SHELXL-97
Zahl der Variablen	196	210
Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-1,071/2,013	-1,939/1,119
Gütefaktoren (I > 2σ(I))	R ₁ = 0,0338 wR ₂ = 0,1008	R ₁ = 0,0373 wR ₂ = 0,0613
Gütefaktoren (alle)	R ₁ = 0,0379 wR ₂ = 0,1033	R ₁ = 0,0648 wR ₂ = 0,0677
Goodness of fit	1,003	0,946
Wichtungsparameter a/b	1,003/0	0,0223/0
CCDC-Nummer	653311	653320

$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + b \cdot P]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$, $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

$[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ (SE = Nd, Sm) ist aus Ketten aufgebaut, die entlang $[100]$ verlaufen und zwischen denen Essigsäuremoleküle eingelagert sind (Abb. 46).

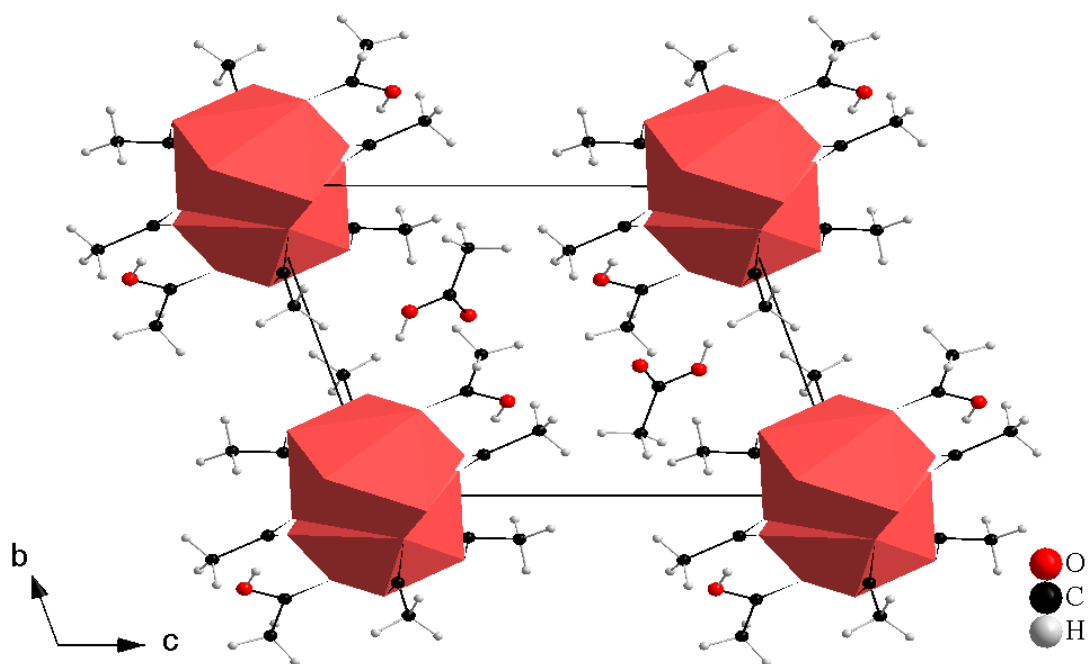


Abb. 46 : Perspektivische Darstellung der Elementarzelle entlang $[100]$ in $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$.

Sie enthalten ein neunfach koordiniertes Metallatom bestehend aus zwei $2\Delta, \mu_2$ - und vier $3\Delta, \mu_1$ -Acetatanionen. Zusätzlich koordiniert ein Essigsäuremolekül an jedes Metallatom, welches stets Wasserstoffbrücken zu einem der beiden verbrückenden $2\Delta, \mu_2$ -Acetatanionen ausbildet (Abb. 47).

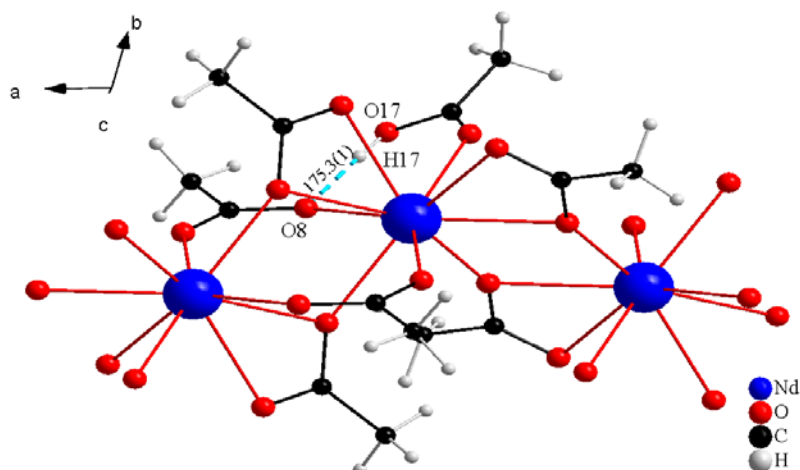


Abb. 47 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Nd^{3+} in $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$.

Die SE–O–Abstände in $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ liegen im Bereich zwischen 241,3(3) und 258,1(6) pm mit einem Mittelwert von 250,8 pm für SE = Nd und im Bereich zwischen 239,2(3) und 255,9(4) pm mit einem Mittelwert von 246,5 pm für SE = Sm. Der Nd–Nd–Abstand beträgt 402,3(7) pm. Der Sm–Sm–Abstand beträgt 391,6(7) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 16 zusammengefasst.

Tabelle 16. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in [SE(OAc)₃(HOAc)](HOAc) mit SE = Nd, Sm.

Nd	O5	241,3(3)	Sm	O6	239,2(3)
Nd	O13	245,4(4)	Sm	O9	240,9(4)
Nd	O4	248,0(3)	Sm	O2	241,6(4)
Nd	O8	249,4(4)	Sm	O4	243,9(4)
Nd	O2	250,4(4)	Sm	O7	245,5(4)
Nd	O6	253,3(4)	Sm	O5	247,5(4)
Nd	O12	253,7(4)	Sm	O6	252,0(3)
Nd	O4	258,1(4)	Sm	O3	252,4(4)
Nd	O5	258,1(4)	Sm	O9	255,9(4)
<Nd	O>	250,8	<Sm	O>	246,5
Nd	Nd	402,3(7)	Sm	Sm	391,6(7)
O17H17	O8	175,3(1)	O8H8	O4	175,8(1)
O7H7	O2	185,8(1)	O18H22	O3	174,3(5)

Die Ketten liegen identisch und gewellt nebeneinander vor mit $\varphi_{(\text{Nd}, \text{Nd}, \text{Nd})} = 139,5(6)^\circ$ und $\varphi_{(\text{Sm}, \text{Sm}, \text{Sm})} = 137,9(3)^\circ$. Sie werden zusätzlich durch das Ausbilden von Wasserstoffbrücken zu den freien Essigsäuremolekülen stabilisiert (Abb 48).

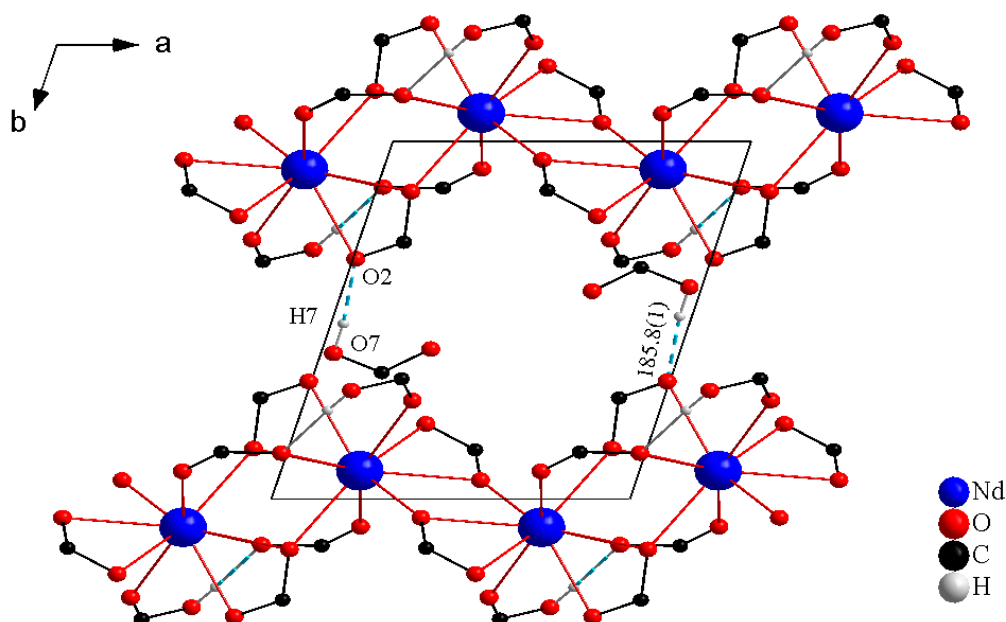


Abb. 48 : Perspektivische Darstellung von übereinander liegenden Ketten in $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$.

4.3.2.2 Pulverdiffraktogramme

Die Pulverdiffraktogramme von $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ (SE = Nd, Sm) wurden zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde jeweils das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 42 gegenübergestellt. Die hergestellten Produkte konnten nicht phasenrein hergestellt werden. Das Samariumacetat-Essigsäure-Addukt $[\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ ist bereits bei der Präparation der Messprobe größtenteils zum Samariumacetathydrat $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ unter Essigsäureverlust zerfallen, wie aus Abb. 49 unten ersichtlich wird.

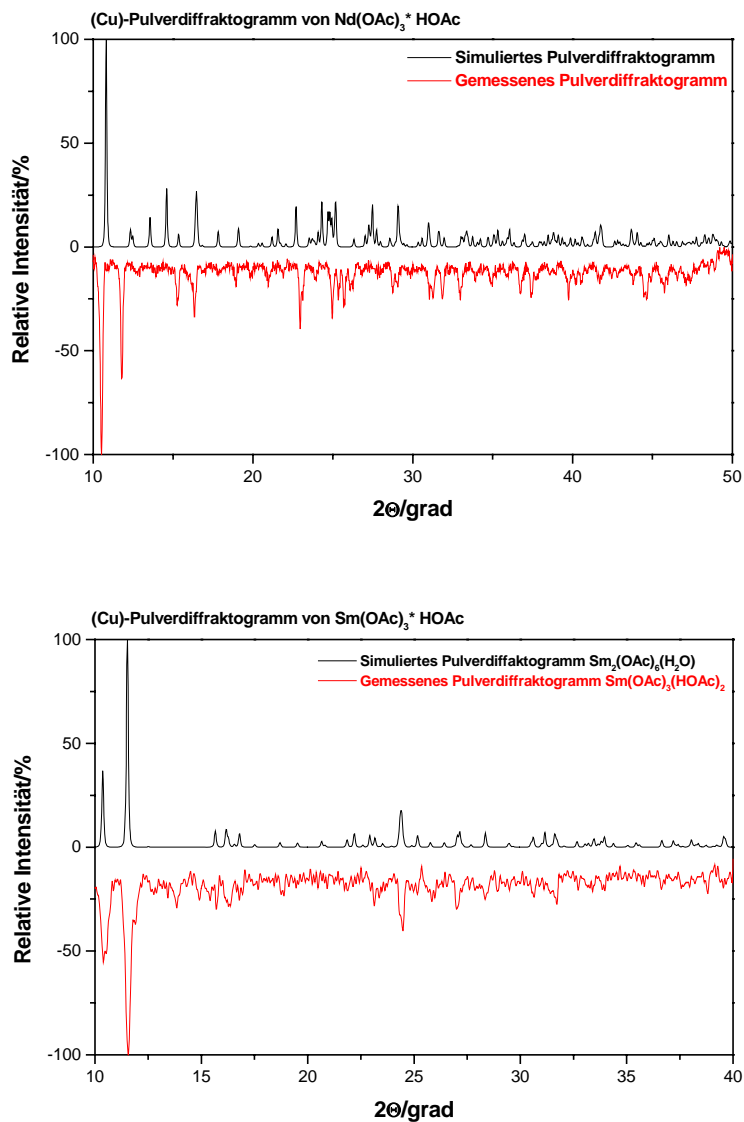


Abb. 49 : Pulverdiffraktogramme von $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ mit SE = Nd (oben), Sm (unten).

4.3.2.3 IR- und Ramanspektrum^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Metallkation näher untersucht werden. Da es sich um isotype Verbindungen handelt, wird repräsentativ das IR- und Ramanspektrum von $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ diskutiert (Abb. 50).

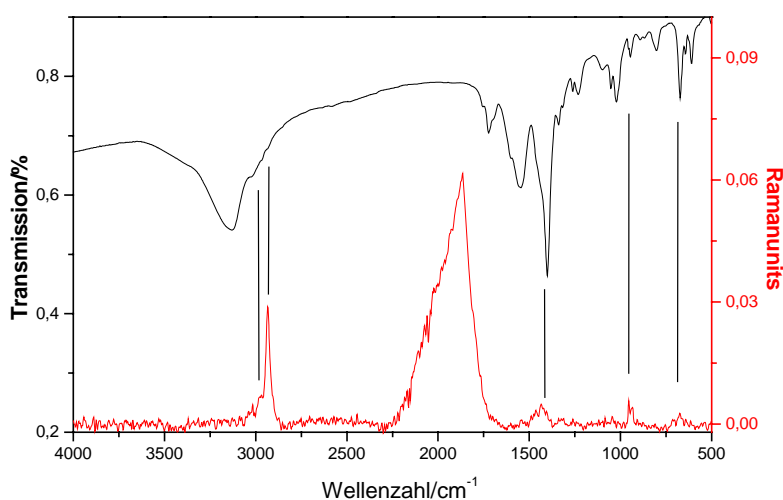


Abb. 50 : IR- und Ramanspektrum von $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$.

Die ungewöhnlich breite Bande bei ca. 2000 cm^{-1} im Ramanspektrum stammt nicht von der Messprobe, sondern ist auf einen apparativen Messfehler zurückzuführen. Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Acetat-Essigsäure-Addukt zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 17). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden.

Tabelle 17. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $[\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3589 – 3043	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	~3014	~2976
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2929	~2929
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1720	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	~1550	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	~1398	~1435
$\nu(\text{C}-\text{O})$	~1336	–
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1095 – 946	~954
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	~798	~949
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	671 – 607	–

4.3.3 Dysprosiumacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$

4.3.3.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Dysprosiumacetat $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$ wurde aus einem Gemisch von 162,5 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Dysprosium und 0,6 ml ($10 \cdot 10^{-3}$ mol) Essigsäure hergestellt. Das Gemisch wurde 8 Tage bei 160°C erhitzt und nochmals 7 Tage bei 100°C getempert. Die Verbindung bildet farblose, nadelförmige Kristalle.

$[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$ kristallisiert monoklin in der Raumgruppe $P2_1/a$ (Nr. 14) mit $a = 896,6(1)$, $b = 2123,4(3)$, $c = 1155,9(3)$ pm, $\beta = 110,1(8)^\circ$, $V = 2065,5(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0354$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 18 zusammengestellt.

Tabelle 18. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Summenformel	$\text{C}_{12}\text{H}_{23}\text{O}_{13}\text{Dy}$	Molmasse [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$]	537,80
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	8
Strahlung	Mo- K_α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-11 \leq h \leq 10$	Anzahl gemessener Reflexe	19547
	$-27 \leq k \leq 27$	Anzahl unabhängiger Reflexe	4609
	$-14 \leq l \leq 14$	Anzahl beobachteter Reflexe	2872
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 48^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	3,675
Anzahl der Bilder	114	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,5380/0,6893
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,3·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	$P2_1/a$ (Nr. 14)
a (pm)	896,6(1)	β ($^\circ$)	110,1(8)
b (pm)	2123,4(3)		
c (pm)	1155,9(3)		
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	2065,5(5)	Formeleinheiten Z	4
Dichte ρ_{calc} ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	1,729	F(000)	1060
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	243
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0354$	Restelektronendichte ($10^6 \text{ e} \cdot \text{pm}^{-3}$)	-2,021/0,977
	$wR_2 = 0,0682$	Goodness of fit	0,895
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0725$	Wichtungsparameter a/b	0,0369/0
	$wR_2 = 0,0786$	CCDC-Nummer	653318

$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

Das Solvoacetat $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$ besteht aus Dimeren mit einer neunfach koordinierten Dysprosiumlage. Die Metallatome werden über zwei $3\Delta, \mu_1$ - und zwei $2\Delta, \mu_2$ - verbrückt, wobei zusätzlich ein 2Δ -Acetatanion, ein Essigsäuremolekül und ein Wassermolekül an jedes Dysprosiumatom koordiniert (Abb. 51).

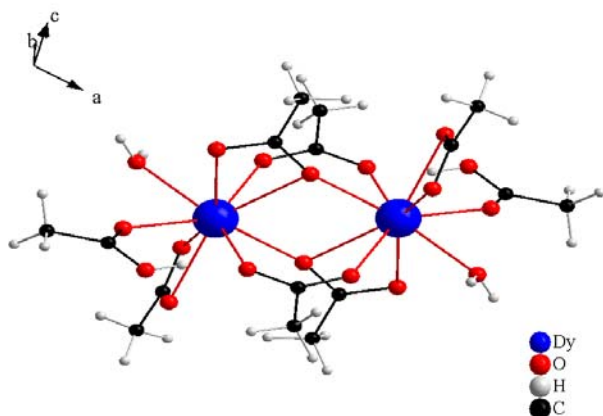


Abb. 51 : Perspektivische Darstellung eines Dimers in $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Die Dimere sind entlang $[010]$ in einer AB-Stapelfolge angeordnet, wobei der Platz zwischen den A, B-Schichten von den freien Essigsäuremolekülen ausgefüllt wird (Abb. 52).

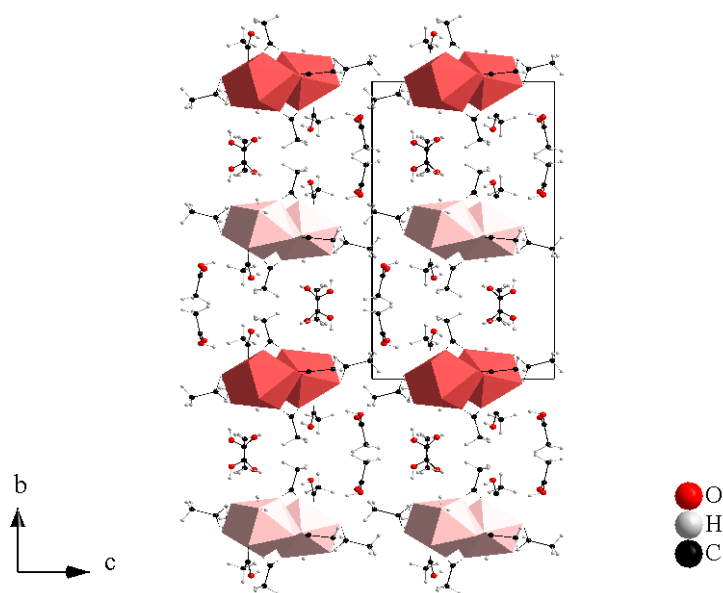


Abb. 52 : Perspektivische Darstellung der Stapelfolge in $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Die Dimeren einer A-Schicht sind zu denen einer benachbarten B-Schicht um einen Winkel zwischen $25,1(4)$ und $26,2(3)^\circ$ geneigt (Abb. 53).

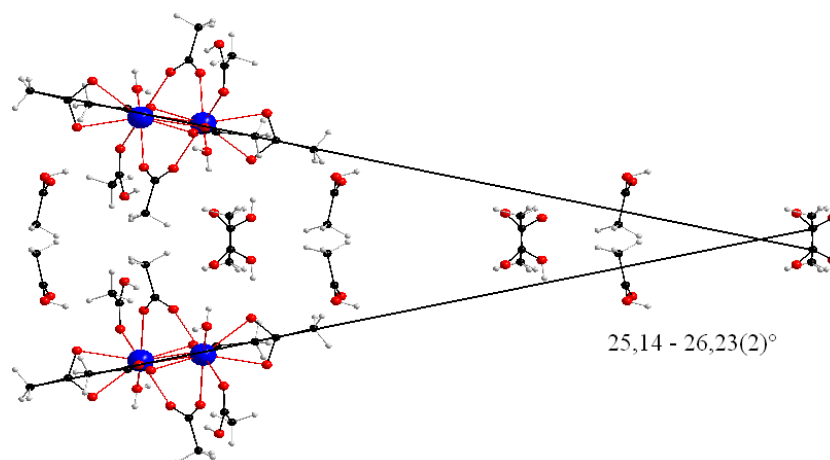


Abb. 53 : Neigungswinkel zwischen den Dimeren zweier Schichten in $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})]\cdot(\text{HOAc})_2$.

Die Struktur wird stabilisiert durch das Ausbilden von Wasserstoffbrücken zwischen den Dimeren sowie zwischen den Dimeren und den freien Essigsäuremolekülen über die koordinierenden Wasser- und Essigsäuremoleküle (Abb. 54).

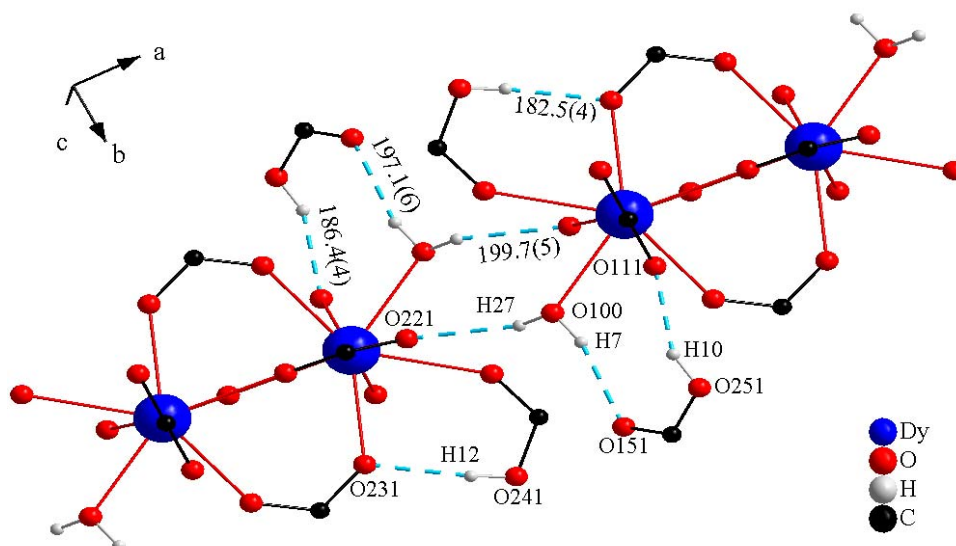


Abb. 54 : Perspektivische Darstellung der Wasserstoffbrücken in $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Die Dy–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 232,2(3) und 258,4(4) pm mit einem Mittelwert von 241,6 pm. Der Dy–Dy–Abstand beträgt 394,1(2) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 19 zusammengefasst.

Tabelle 19. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Dy	O121	232,2(3)	<Dy O>	241,6
Dy	O100	235,2(4)	Dy Dy	394,1(2)
Dy	O131	235,1(4)		
Dy	O231	238,7(4)		
Dy	O221	242,8(4)		
Dy	O141	243,6(4)		
Dy	O111	244,3(4)		
Dy	O211	244,7(4)		
Dy	O121	258,4(4)		
O241H12	O231	182,5(4)		
O251H10	O111	186,4(4)		
O100H7	O151	197,1(6)		
O100H27	O221	199,7(5)		

4.3.3.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Das erhaltene Produkt konnte nicht phasenrein erhalten werden. Das Diffraktogramm konnte nicht im Vergleich mit eventuellen Abbauprodukten wie dem Solvoacetat $[\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})](\text{HOAc})$ und das Hydroacetat $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ in Verbindung gesetzt werden (Abb. 55). Wahrscheinlich ist, dass es sich um ein unbestimmtes Gemisch mehrerer Abbauprodukte handelt.

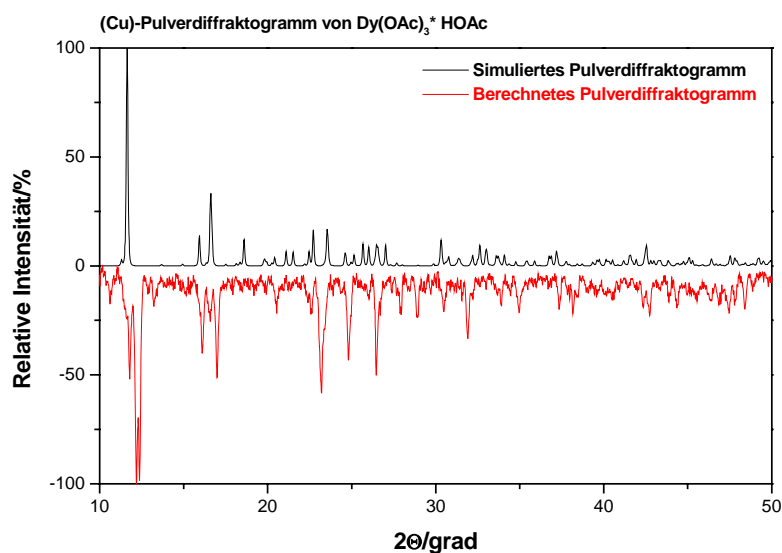


Abb. 55 : Pulverdiffraktogramm von $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

4.3.3.3 IR- und Ramanspektrum^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Dysprosiumkation näher untersucht werden (Abb. 56).

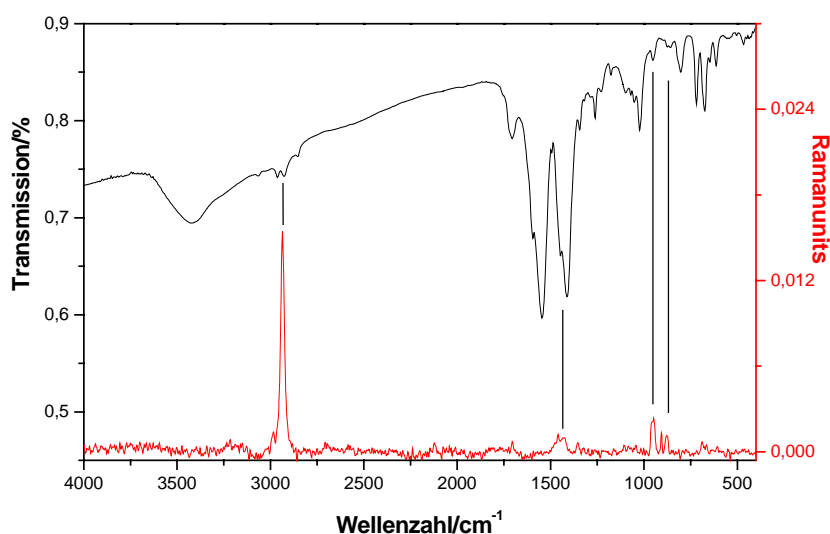


Abb. 56 : IR- und Ramanspektrum von $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Acetatsolvat zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 20). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden.

Tabelle 20. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $[\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})](\text{HOAc})_2$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3654 – 3030	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	3654 – 3030	~2935
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2854	~2929
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1708	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	~1542	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	~1411	1462 – 1429
$\nu(\text{C}-\text{O})$	1344 – 1259	–
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1097 – 948	~945
$\delta(\text{C}-\text{C})$	871 – 806	–
$\delta(\text{COO}^-)$, $\tau(\text{COO}^-)$	717 – 607	–

4.4 Propionate

4.4.1 Einleitung

Übergangsmetallpropionate sind hinsichtlich ihrer Kristallstrukturen nur geringfügig erforscht. Als wasserfreies Propionat Zn(OPr)_2 ist bekannt, welches in der monoklinen Raumgruppe $\text{P2}_1/\text{a}$ kristallisiert und eine zweidimensionale Struktur aufbaut [16]. Jedes Zinkatom ist tetraedrisch umgeben und über $2\Delta, \mu_2$ -Propionateinheiten zu vier weiteren Zinkatomen verbrückt unter Bildung von Rechtecken. Die Verbindung wurde aus einer propionsauren Lösung von Zinkcarbonat unter Zusatz von Propionsäureanhydrid erhalten.

Aus der Reihe der Propionathydrate ist das Manganpropionat $[\text{Mn(OPr)}_2(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})$ bekannt [17]. Die Verbindung kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $\text{C2}/\text{c}$ unter Bildung einer Kettenstruktur entlang $[010]$. Die Ketten enthalten verzerrt oktaedrisch koordinierte Manganatome, die über ein Wassermolekül, eine 1Δ - und eine $2\Delta, \mu_2$ -Propionateinheit verbrückt werden. Zwischen den Ketten ist ein Kristallwassermolekül eingelagert. Die Verbindung wurde aus einer propionsauren Lösung von Manganhydroxid durch langsames Eindampfen erhalten.

Ein weiteres Propionathydrat ist das Praseodympropionat $\text{Pr(OPr)}_3(\text{H}_2\text{O})_3$, das in der monoklinen Raumgruppe $\text{P2}_1/\text{c}$ in Form einer Kettenstruktur kristallisiert [12]. Die Ketten enthalten zwei röntgenographische unterschiedliche Praseodymlagen. Die Praseodymatome werden über zwei $3\Delta, \mu_1$ -Propionatanionen verbrückt. Pr1 koordiniert zusätzlich noch drei Wassermoleküle und erreicht eine Koordinationszahl von neun. Pr2 koordiniert zusätzlich noch zwei 2Δ -Propionatanionen und erreicht eine Koordinationszahl von zehn, wobei die formal per Summenformal zugehörigen drei Wassermoleküle als Kristallwasser zwischen den Ketten vorliegen. Die Verbindung wurde aus einer propionsauren Lösung von Praseodymhydroxid durch langsames Eindampfen erhalten.

In Rahmen dieser Arbeit konnten mit Fe(OPr)_2 eine dreidimensionale Netzstruktur und mit $\text{Nd(OPr)}_3(\text{HOPr})$ ein Propionat-Propionsäure-Addukt beigefügt werden.

4.4.2 Eisenpropionat, $\text{Fe}(\text{OPr})_2$

4.4.2.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Eisenpropionat $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ ist aus der Umsetzung von 55,8 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Eisen und 0,3 ml ($4 \cdot 10^{-3}$ mol) Propionsäure entstanden. Das Gemisch wurde 5 Tage bei 160°C erhitzt und einen Tag lang bei 100°C getempert. Es wurde zunächst eine rötliche, leicht viskose Lösung erhalten. Durch langsames Abdampfen der übrigen Säure in einer Schlenkvorrichtung mit Seitenhahn konnten nach ca. 1 Woche farblose, polyedrische Kristalle erhalten werden.

$\text{Fe}(\text{OPr})_2$ kristallisiert in der rhomboedrischen Raumgruppe $\bar{R}3c$ (Nr. 167) mit $a = 2349,9(3)$, $c = 4475,7(7)$ pm, $V = 21403(5) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 30$ und $R_1 = 0,0934$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 21 wiederzufinden.

Das Eisenpropionat $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ baut eine dreidimensionale Netzstruktur aus Ringen auf, die aus zwölf verknüpften Eisenatomen bestehen und durch Propionatanionen verbrückt werden. $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ enthält drei röntgenographisch unterschiedliche Eisenlagen. Ein Ring besteht aus jeweils sechs abwechselnd miteinander verknüpften Fe1O_6 - und Fe2O_6 -Polyedern, die wiederum über sechs äußere Fe3O_6 -Polyedern zu den nächsten Ringen verknüpft werden (Abb. 57).

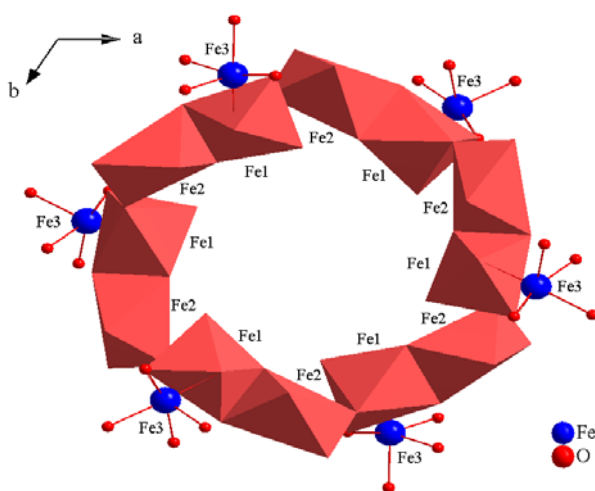


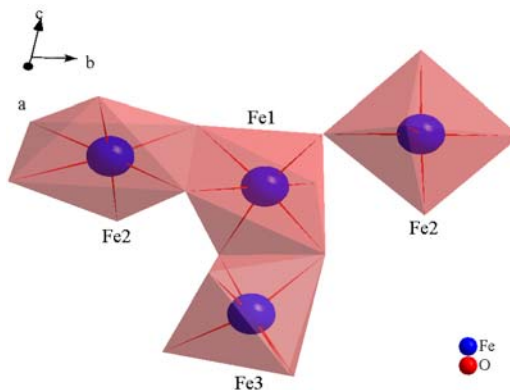
Abb. 57 : Perspektivische Darstellung eines Fe_{12} -Ringes in $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

Tabelle 21. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von Fe(OPr)_2 .

Summenformel	$\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_4\text{Fe}$	Molmasse [$\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$]	201,99
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	15
Strahlung	Mo- $\text{K}\alpha$	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-27 \leq h \leq 27$	Anzahl gemessener Reflexe	76868
	$-28 \leq k \leq 28$	Anzahl unabhängiger Reflexe	4240
	$-35 \leq l \leq 35$	Anzahl beobachteter Reflexe	1249
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
	$0^\circ \leq \omega \leq 102^\circ$; $\psi = 90^\circ$		
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	1,554
Anzahl der Bilder	141	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,6338/0,8291
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,1-0,1-0,1	Kristallform	Polyeder
Kristallsystem	trigonal	Raumgruppe	$\bar{R}3c$ (Nr.167)
a (pm)	2349,9(3)	Zellvolumen ($10^6\cdot\text{pm}^3$)	21403(5)
c (pm)	4475,7(7)	Formeleinheiten Z	90
Dichte ρ_{calc} ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)	1,410	F(000)	9360
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	252
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0934$	Restelektronendichte ($10^6\cdot\text{e}\cdot\text{pm}^{-3}$)	-0,440/0,844
	$wR_2 = 0,1746$	Goodness of fit	0,861
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,2716$	Wichtungsparameter a/b	0,0739/0
	$wR_2 = 0,2380$	CCDC-Nummer	653321

$R_1 = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

Die drei Eisenlagen sind mehr oder weniger verzerrt oktaedrisch umgeben, wobei die Polyeder um Fe1 kantenverknüpft mit jenen um Fe3 und jenen eines Fe2, sowie mit jenen eines zweiten Fe2 eckenverknüpft vorliegen (Abb. 58).

**Abb. 58 :** Polyedrische Darstellung Umgebung um Fe^{2+} in Fe(OPr)_2 .

Das zum Polyeder um Fe1 kantenverknüpfte Polyeder um Fe2 ist zum Polyeder des nächsten Fe1 über eine Ecke verknüpft, so dass sich Kanten- und Eckenverknüpfung zwischen den benachbarten Polyedern um Fe1 und Fe2 abwechseln. Das Polyeder um Fe3 liegt stets kantenverknüpft mit den Polyedern um die beiden benachbarten Fe1 vor und bildet somit das Bindeglied zwischen den Fe_{12} – Ringen (Abb. 57). Solch eine $\text{Fe1(Fe2)}_2\text{Fe3}$ – Zweigstelle (Abb. 58) ist in drei Richtungen zu weiteren Zweigstellen verknüpft, aus denen dann eine Netzstruktur aufgebaut wird (Abb. 59).

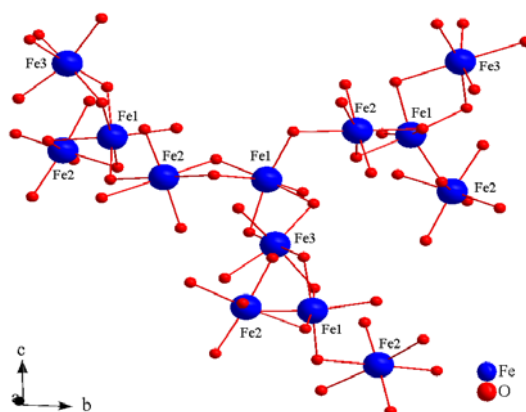


Abb. 59 : Perspektivische Darstellung eines Ausschnitts in Fe(OPr)_2 .

Fe1 ist zu einem Fe2 über eine $2\Delta, \mu_2$ -, eine $3\Delta, \mu_1$ - und eine $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ -Propionatanionen verbrückt, wobei die $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ -Einheit Fe1 und Fe2 mit Fe3 verbindet. Mit dem zweiten Fe2 ist Fe1 über drei $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ -Propionatanionen verbrückt, zwei davon verbinden Fe1 und Fe2 weiter zu Fe3 und eine zum nächsten Fe1 (Abb. 60).

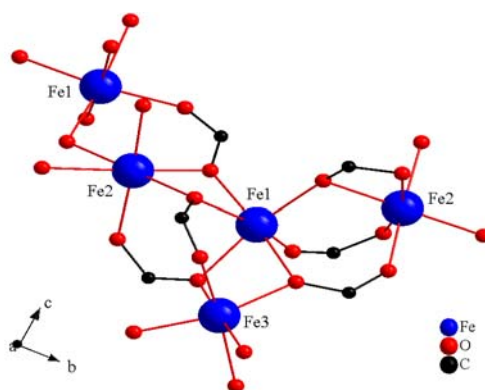


Abb. 60 : Perspektivische Darstellung der Verknüpfung zwischen benachbarten Eisenatomen in Fe(OPr)_2 .

Die Fe–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 202,1(0) und 223,1(2) pm mit einem Mittelwert von 212,7 pm. Die Fe–Fe–Abstände liegen im Bereich zwischen 323,3(4) und 346,1(5) pm mit einem Mittelwert von 332,2 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 22 zusammengefasst.

Tabelle 22. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte von $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

Fe1	O8	205,7(11)	<Fe1 O>	212,3
Fe1	O6	206,8(11)	<Fe1 Fe2>	336,7
Fe1	O13	208,8(10)	Fe1 Fe3	323,3(4)
Fe1	O7	214,7(11)		
Fe1	O4	218,0(11)		
Fe1	O12	219,9(11)		
Fe2	O10	202,1(10)	<Fe2 O>	213,1
Fe2	O11	207,2(12)		
Fe2	O7	211,3(10)		
Fe2	O4	216,2(11)		
Fe2	O8	218,5(11)		
Fe2	O5	223,1(12)		
2xFe3	O9	206,6(11)	<Fe3 O>	212,8
2xFe3	O12	211,1(11)		
2xFe3	O13	220,6(11)		

Die Ringe werden sowohl in $[100]$ als auch in $[010]$ in hexagonaler Anordnung verknüpft, wobei sie in $[010]$ blickend durch Ringe, die nahezu senkrecht entlang $[010]$ verlaufen, getrennt werden bzw. in $[100]$ blickend durch Ringe, die entlang $[100]$ verlaufen (Abb. 61).

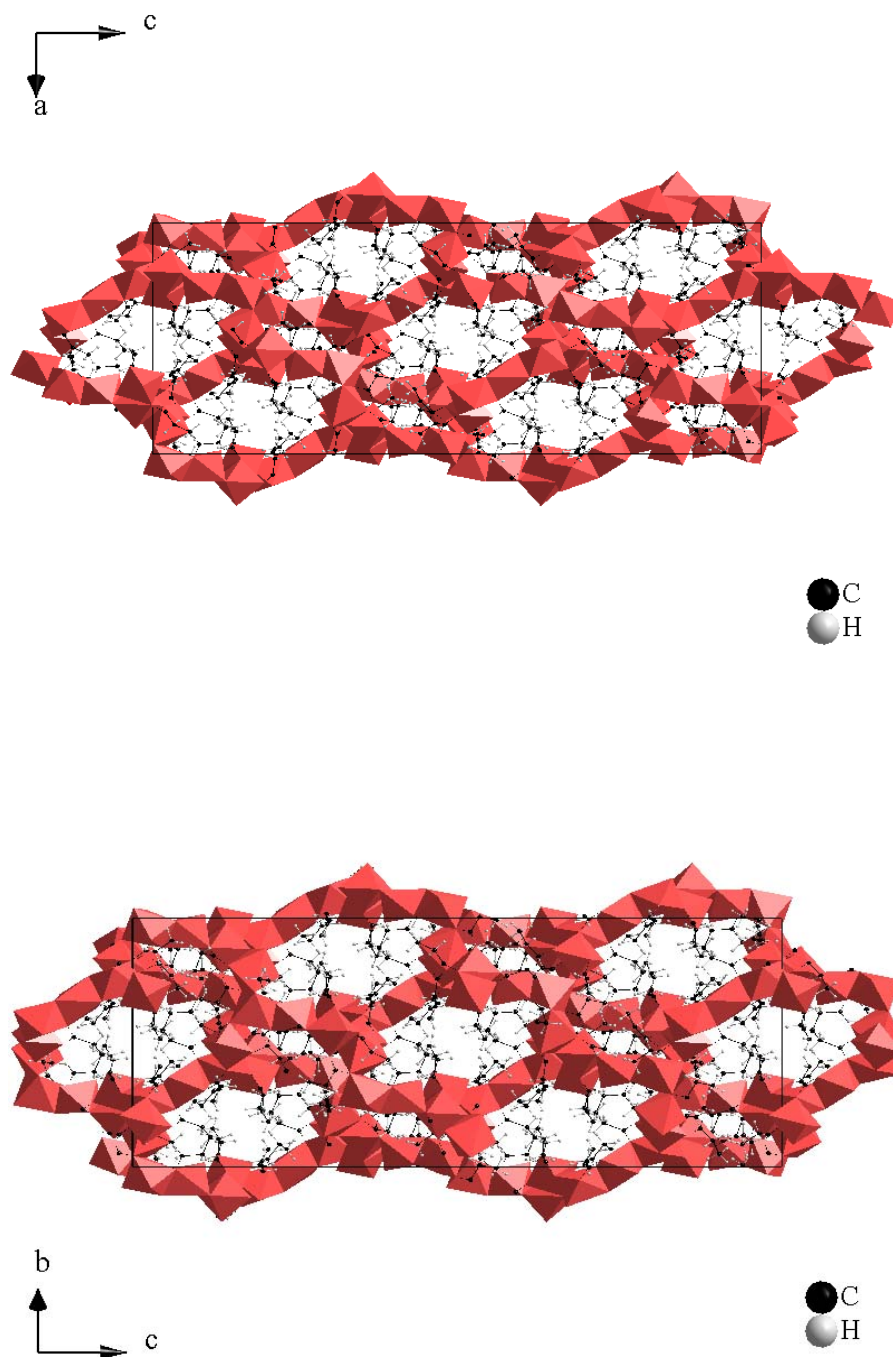


Abb. 61 : Polyedrische Darstellung verknüpfter Ringe in (010) und (100) in $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

Aus diesen in (100) und (010) gebildeten Flächen mit verknüpften Ringen entstehen entlang [001] hexagonal angeordnete Kanäle. Diese Kanäle werden größtenteils durch den aliphatischen Rest der Propionateinheiten ausgefüllt. Der zurückbleibende Hohlraum hat einen Durchmesser von 1782,2(8) bis 2280,5(9) pm (Abb. 62).

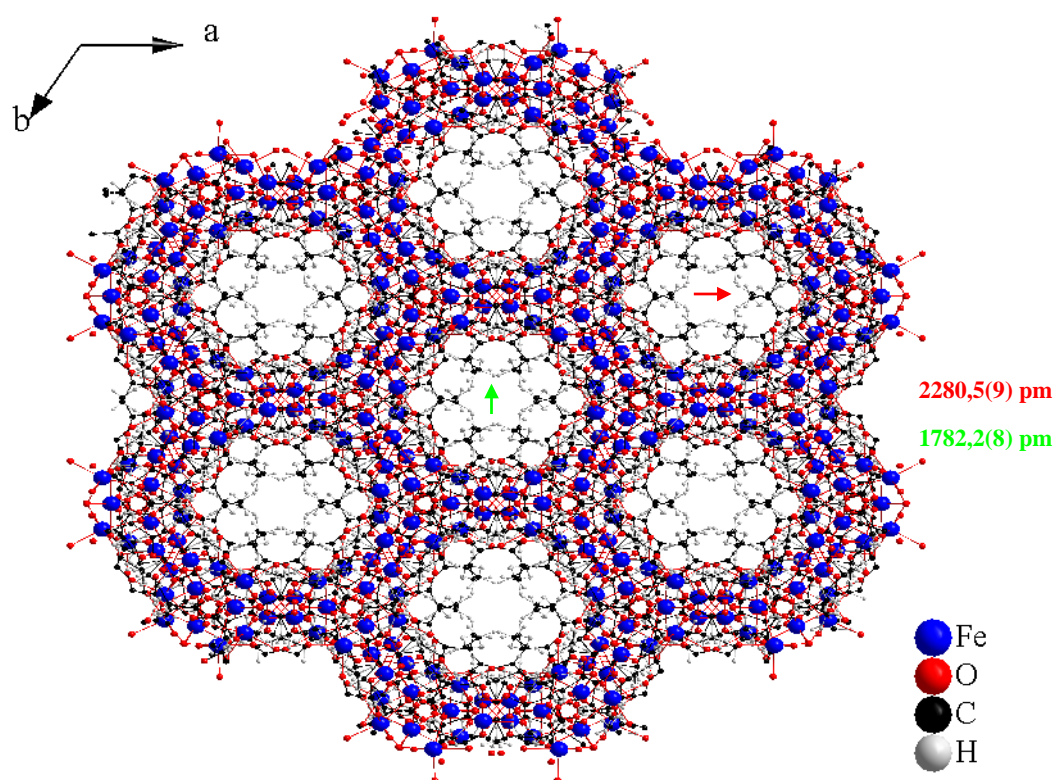


Abb. 62 : Perspektivische Darstellung der entlang [001] verlaufenden Kanäle in $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

4.4.2.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 63 gegenübergestellt. Das erhaltene Produkt sieht phasenrein aus, wobei die Unstetigkeiten (blauer Kasten) im mittleren Bereich auf apparative Ursachen zurückzuführen sind.

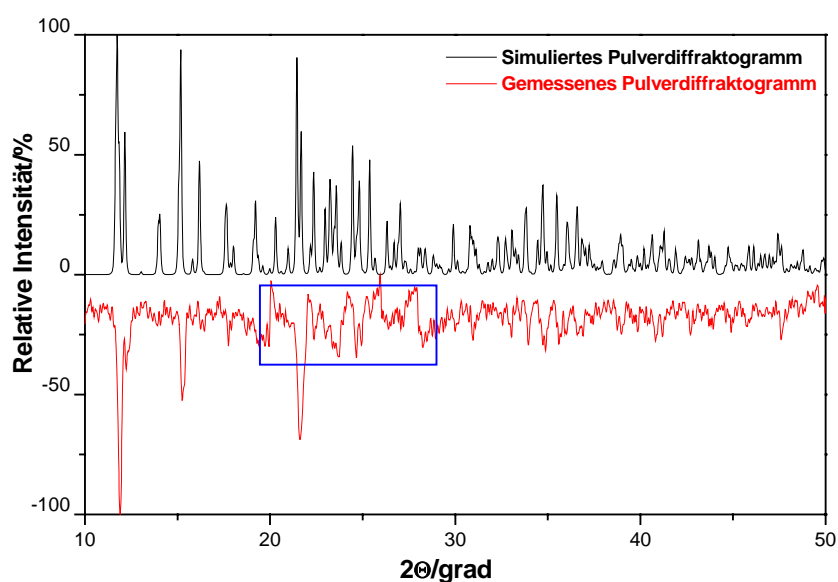


Abb. 63 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

4.4.2.3 IR- und Ramanspektrum^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Eisenkation näher untersucht werden (Abb. 64).

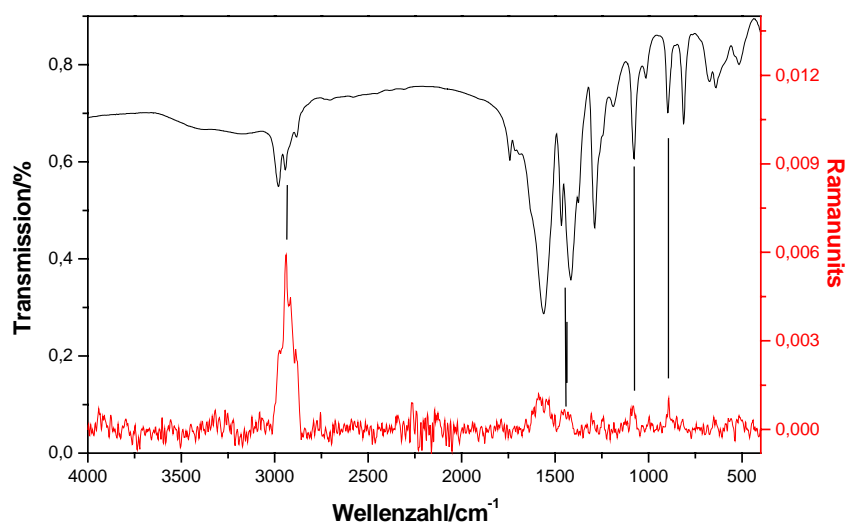


Abb. 64 : IR- und Ramanspektrum von Fe(OPr)_2 .

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Propionat zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 23). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden.

Tabelle 23. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum in Fe(OPr)_2 .

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	2977 – 2942	2973 – 2886
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2881	
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1741	
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	~1562	1589 – 1544
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	1465 – 1375	1459 – 1415
$\nu(\text{C}-\text{O})$	1268 – 1184	
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1079 – 1012	~1081
$\delta(\text{C}-\text{C})$	896 – 811	~892
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	673 – 511	

4.4.3 Neodympropionatsolvat, $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$

4.4.3.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Neodympropionat $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$ ist aus der Umsetzung von 144,2 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) und 0,5 ml ($8 \cdot 10^{-3}$ mol) Propionsäure erhalten worden. Das Gemisch wurde 4½ Tage bei 150°C erhitzt. Die Verbindung bildet rosa, nadelförmige Kristalle.

Kristalle von $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$ kristallisieren triklin in der Raumgruppe $P\bar{1}$ (Nr. 2) mit den Kristallparametern $a = 1193,9(8)$, $b = 1228,2(8)$, $c = 1346,3(1)$ pm, $\alpha = 105,5(5)$, $\beta = 96,4(5)$, $\gamma = 113,7(9)^\circ$, $V = 1685,1(4) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0352$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 24 zusammengefasst.

Tabelle 24. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

Summenformel	$\text{C}_{12}\text{H}_{21}\text{O}_8\text{Nd}$	Molmasse [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$]	437,53
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	7
Strahlung	Mo- K_α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-15 \leq h \leq 15$	Anzahl gemessener Reflexe	18168
	$-15 \leq k \leq 15$	Anzahl unabhängiger Reflexe	7381
	$-15 \leq l \leq 17$	Anzahl beobachteter Reflexe	5636
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
	$0^\circ \leq \omega \leq 72^\circ$; $\psi = 90^\circ$		
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	3,112
Anzahl der Bilder	126	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,4492/0,7493
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,5·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	triklin	Raumgruppe	$P\bar{1}$ (Nr. 2)
a (pm)	1193,9(8)	α ($^\circ$)	105,5(5)
b (pm)	1228,2(8)	β ($^\circ$)	96,4(5)
c (pm)	1346,3(1)	γ ($^\circ$)	113,7(9)
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	1685,1(4)	Formeleinheiten Z	4
Dichte ρ_{calc} ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	1,725	F(000)	868
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	384
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0352$	Restelektronendichte ($10^6 \text{e} \cdot \text{pm}^{-3}$)	-1,336/1,152
	$wR_2 = 0,0898$	Goodness of fit	0,997
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0491$	Wichtungssparameter a/b	0,0651/0
	$wR_2 = 0,0993$	CCDC-Nummer	653317

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + b \cdot P] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Das Propionat-Propionsäure-Addukt $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$ bildet Ketten aus, die entlang [001] verlaufen und zwei jeweils neunfach koordinierte Neodymlagen enthalten. Der Raum zwischen den Ketten wird größtenteils durch den aliphatischen Rest der Propionateinheiten ausgefüllt (Abb. 65):

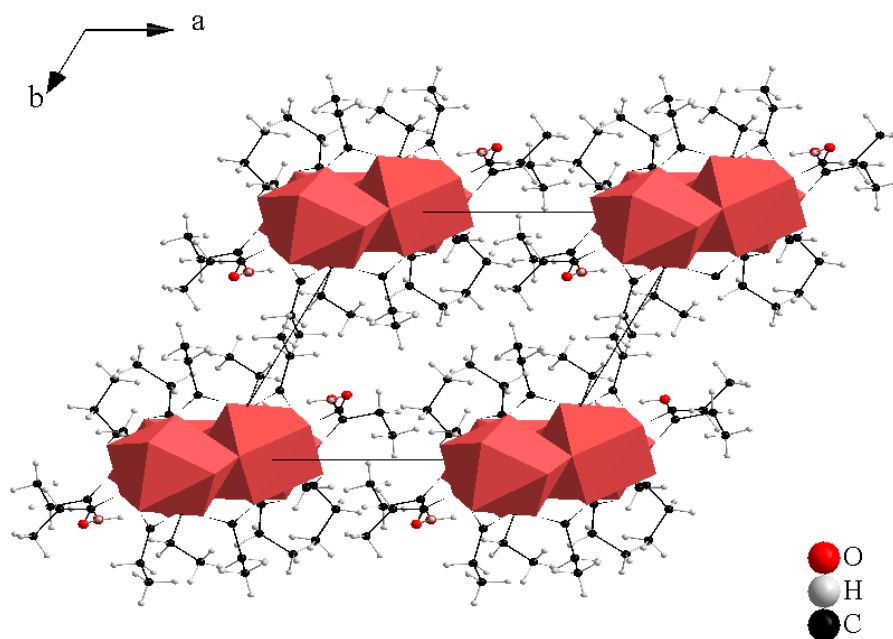


Abb. 65 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang [001] in $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

Innerhalb der Ketten sind zwei gleiche Neodymlagen abwechselnd miteinander verknüpft, d.h. jede Erhebung bzw. Welle beinhaltet zwei Nd1- und zwei Nd2-Atome. Die beiden Nd1-Atome sind über zwei $2\Delta, \mu_2$ -, ein $3\Delta, \mu_1$ - und ein $4\Delta, \mu_2$ -Propionatanionen verbrückt. Das $4\Delta, \mu_2$ -Propionatanion verknüpft die beiden Nd1-Atome zum nächsten Nd2 und koordiniert chelatisierend an dem benachbarten Nd1. Benachbarte Nd1- und Nd2-Atome sind zusätzlich noch mit einem $2\Delta, \mu_2$ - und einem $3\Delta, \mu_1$ - Propionatanion verknüpft. Die beiden Nd2-Atome sind dann über zwei $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Propionatanionen verbunden (Abb. 66). Je eins der beiden Propionsäuremoleküle koordiniert stets an einem der beiden Neodymlagen und stabilisiert die Struktur über Wasserstoffbrückenbindung.

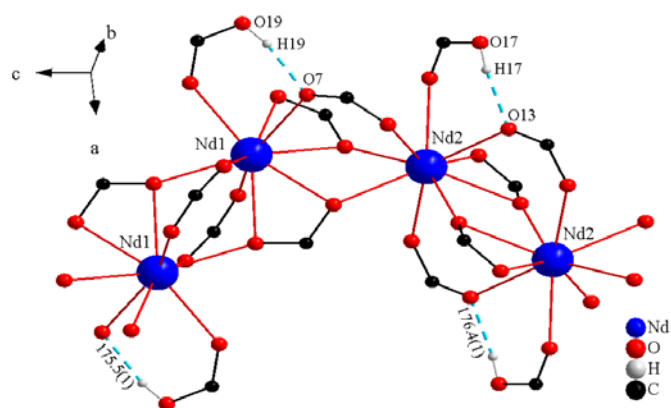


Abb. 66 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Nd^{3+} in $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

Die Nd–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 237,9(3) und 257,5(3) pm mit einem Mittelwert von 249,6 pm. Die Nd–Nd–Abstände liegen im Bereich zwischen 403,2(5) und 413,9(1) pm mit einem Mittelwert von 407,8 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 25 zusammengefasst.

Tabelle 25. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte von Nd(OPr)₃(HOPr).

Nd1	O14	239,5(4)	Nd2	O3	237,9(3)
Nd1	O11	241,1(4)	Nd2	O6	242,1(3)
Nd1	O4	245,5(3)	Nd2	O8	243,7(3)
Nd1	O7	249,3(3)	Nd2	O10	244,9(4)
Nd1	O16	250,4(3)	Nd2	O15	253,9(4)
Nd1	O9	252,2(4)	Nd2	O13	255,1(3)
Nd1	O6	253,4(4)	Nd2	O12	255,6(3)
Nd1	O4	256,3(3)	Nd2	O5	256,7(3)
Nd1	O5	256,7(3)	Nd2	O3	257,5(3)
<Nd1 O>		249,4	<Nd2 O>		249,7
Nd1	Nd1	403,2(5)	Nd2	Nd2	406,3(7)
Nd1	Nd2	413,9(1)			
O19H19	O7	175,5(1)	O17H17	O008	176,4(1)

Benachbarte Ketten liegen parallel und wellenartig mit $\varphi_{(\text{Nd1}, \text{Nd1}, \text{Nd2})} = 118,4(2)$ und $\varphi_{(\text{Nd2}, \text{Nd2}, \text{Nd1})} = 142,3(0)^\circ$ nebeneinander vor (Abb. 67).

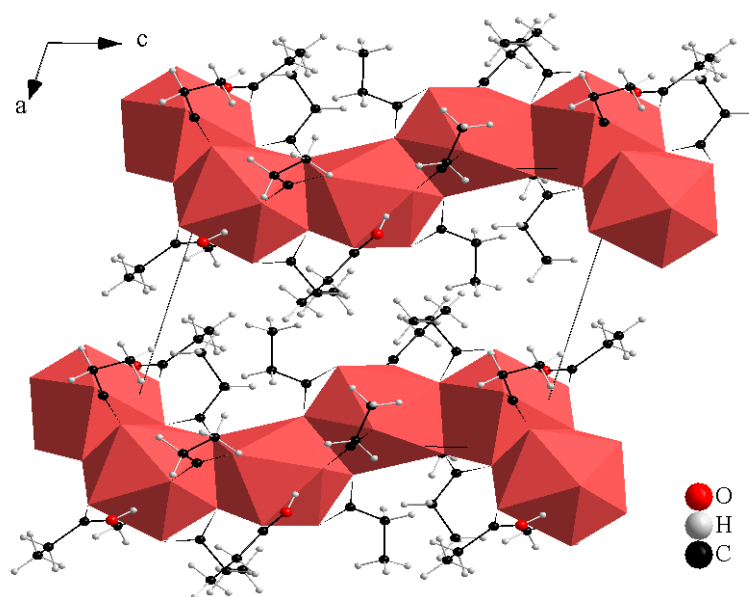


Abb. 67 : Polyedrische Darstellung zweier von übereinander liegenden Ketten in $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

4.4.3.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 68 gegenübergestellt. Bei der Probenpräparation im Mörser hat sich die Verbindung zunächst verflüssigt und das nach dem stehen lassen erhaltene Pulver wies kaum Reflexe auf. Es ist daher keine Aussage über die Phasenreinheit möglich.

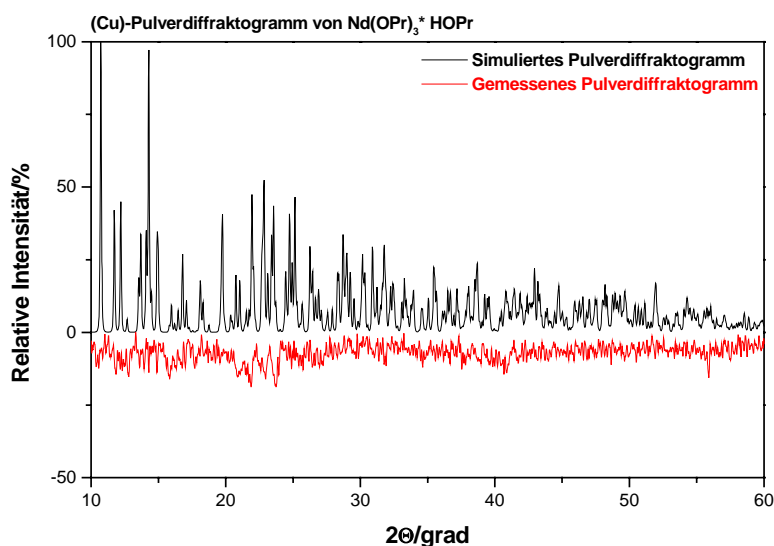


Abb. 68 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

4.4.3.3 IR- und Ramanspektrum^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Neodymkation näher untersucht werden (Abb. 69).

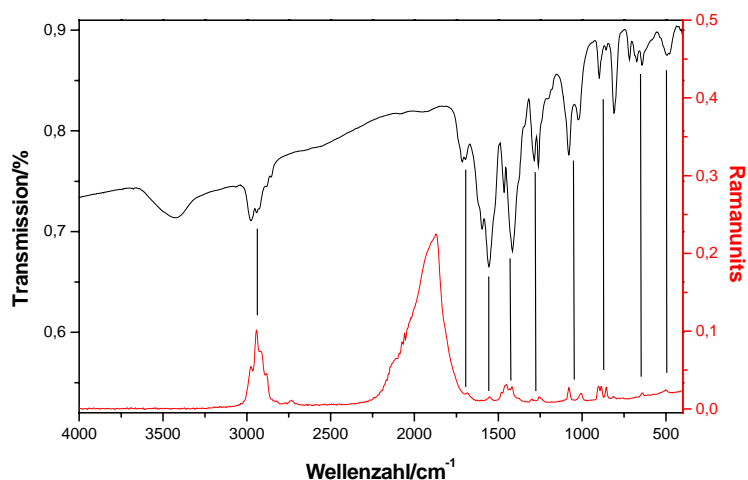


Abb. 69 : IR- und Ramanspektrum von $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Propionat-Propionsäure-Addukt zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 26). Die ungewöhnlich breite Bande bei ca. 2000 cm^{-1} im Ramanspektrum stammt nicht von der Messprobe, sondern ist auf einen apparativen Messfehler zurückzuführen. Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden.

Tabelle 26. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3648 – 3039	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	2975 – 2942	2975 – 2881
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	2879 – 2854	–
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1704	~1685
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	1594 – 1558	~1552
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	1465 – 1413	1452 – 1417
$\nu(\text{C}-\text{O})$	1284 – 1259	1297 – 1251
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1079 – 1018	1076 – 1006
$\delta(\text{O}-\text{OH})$	896 – 806	900 – 815
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	715 – 499	640 – 4978

4.5 Benzoate

4.5.1 Einleitung

Im Bereich der Übergangsmetallcarboxylate sind die reinen Benzoate nur wenig erforscht. Benzoate mit Einlagerungen wie Wasser oder organischen Lösemittelmolekülen sind dagegen bekannt. Meist werden sie aus dem Übergangsmetallsalz und einem Salz der Benzoesäure in einem polaren Lösemittel hergestellt und daraus kristallisiert.

Ein Beispiel für ein Übergangsmetallbenzoat ist das Cobaltbenzoat $\text{Co}(\text{OBz})_2$ [18]. Die Verbindung kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $C2/c$ und ist isotyp zu der im nächsten Kapitel vorgestellten Verbindung $\text{Fe}(\text{OBz})_2$. $\text{Co}(\text{OBz})_2$ baut eine Kettenstruktur auf und enthält zwei röntgenographische unterschiedliche Cobaltlagen, beide sechsfach koordiniert. Der Co–Co–Abstand liegt bei 314,5(1) pm. Der Co–O–Abstand liegt im Bereich zwischen 193,6 und 254,0 pm mit einem Mittelwert von 214,0 pm. Hergestellt wurde die Verbindung aus Cobaltacetylacetonat in einer Schmelze von Benzoesäure bei 150°C.

Im Rahmen dieser Arbeit konnten weitere Benzoate hergestellt werden, das bereits erwähnte Eisenbenzoat $\text{Fe}(\text{OBz})_2$, das Praseodymbenzoat $\text{Pr}(\text{OBz})_3$, das Gadoliniumbenzoat $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ und das Holmiumbenzoat $\text{Ho}(\text{OBz})_3$. Alle hergestellten Verbindungen haben Kettenstrukturen, in denen die Ketten mehr oder weniger gewellt vorliegen. Die beiden letzteren Verbindungen enthalten helikale Ketten.

4.5.2 Eisenbenzoat^[19, 20], $\text{Fe}(\text{OBz})_2$

4.5.2.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Eisenbenzoat $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ wurde aus der Umsetzung von 55,8 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Eisen und 488,2 mg ($4 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure erhalten. Das Gemisch wurde 4 Tage bei 150°C erhitzt und 2 Tage bei 100°C getempert. Die Verbindung kristallisiert in Form von gelben Nadeln.

Das Koordinationspolymer $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $C2/c$ (Nr. 15) mit $a = 1703,6(3)$, $b = 1422,2(3)$, $c = 1064,5(2)$ pm, $\beta = 94,7(1)^\circ$, $V = 2570,4(7) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0443$ [$I > 2\sigma(I)$]. $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ ist isotyp zur bekannten Verbindung $\text{Co}(\text{OBz})_2$. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 27 wiederzufinden.

Tabelle 27. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Summenformel	$\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{O}_4\text{Fe}$	Molekulargewicht [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$]	298,07
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	25
Strahlung	Mo- K_α	Detektorabstand (mm)	100
Temperatur (K)	170	2θ Bereich ($^\circ$)	2,29 - 59,53
Indexbereich	$-20 \leq h \leq 20$	Anzahl gemessener Reflexe	14399
	$-17 \leq k \leq 17$	Anzahl unabhängiger Reflexe	2533
	$-11 \leq l \leq 13$	Anzahl beobachteter Reflexe	1439
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 112^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionkoeffizient μ (mm^{-1})	1,179
Anzahl der Bilder	146	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,4631/0,6123
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,3·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	$C2/c$ (Nr. 15)
a (pm)	1703,6(3)	β ($^\circ$)	94,7(1)
b (pm)	1422,2(3)		
c (pm)	1064,5(2)		
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	2570,4(7)	Formeleinheiten Z	8
Dichte ρ_{calc} ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	1,540	F(000)	1216
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97 (Sheldrick)	Zahl der Variablen	215
Gütefaktoren ($I > 2\sigma I$)	$R_1 = 0,0443$	Restelektronendichte ($10^6 \text{ e} \cdot \text{pm}^{-3}$)	-0,483/0,621
	$wR_2 = 0,0833$	Goodness of fit	0,949
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0972$	Wichtungsparameter a/b	0,0385/0
	$wR_2 = 0,0965$	CCDC-Nummer	653316

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + b \cdot P] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

$\text{Fe}(\text{OBz})_2$ bildet eine Kettenstruktur. Die Ketten verlaufen zueinander parallel entlang $[001]$ und weisen eine Wellenform auf mit $\phi(\text{Fe}2, \text{Fe}2, \text{Fe}2) = 109,5(3)^\circ$. Die Zwischenräume werden durch die aromatischen Reste der Benzoateinheiten ausgefüllt (Abb. 70).

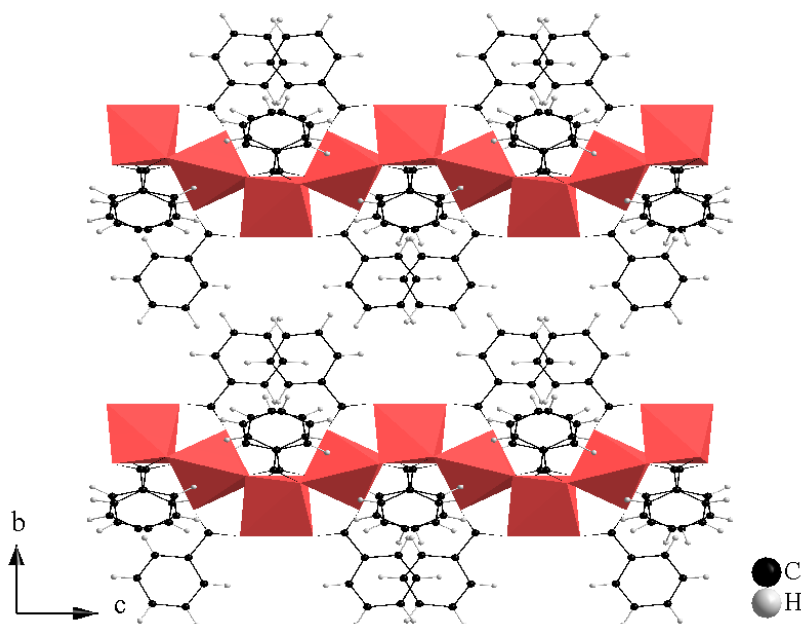


Abb. 70 : Polyedrische Darstellung zweier benachbarter Ketten in $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Sie enthalten zwei röntgenographisch unterschiedliche Eisenlagen, beide sechsfach koordiniert, wobei Fe1 oktaedrisch umgeben ist und Fe2 einen für Fe^{2+} ungewöhnliches Polyeder bildet. Die Eisenatome werden über ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $4\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt, dabei greifen beide $4\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen chelatisierend an Fe2 an und verbrücken dieses weiter zu zwei benachbarten Fe1 (Abb. 71).

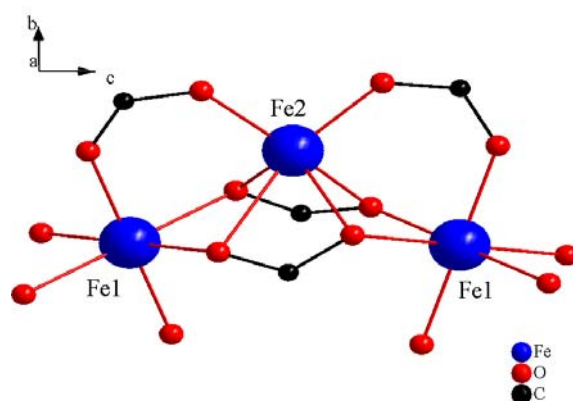


Abb. 71 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Fe^{2+} in $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Die Fe–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 195,1(3) und 245,0(7) pm mit einem Mittelwert von 216,4 pm. Der Fe–Fe–Abstand liegt bei 325,8(1) pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 28 zusammengefasst.

Tabelle 28. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

2xFe1	O3	204,1(3)	2xFe2	O6	195,1(3)
2xFe1	O4	216,9(3)	2xFe2	O5	215,1(3)
2xFe1	O5	222,2(3)	2xFe2	O4	245,0(7)
<Fe1	O>	214,4	<Fe2	O>	218,4
Fe1	Fe2	325,8(1)			

Die Ketten sind nach Art einer hexagonalen Stabpackung angeordnet (Abb. 72).

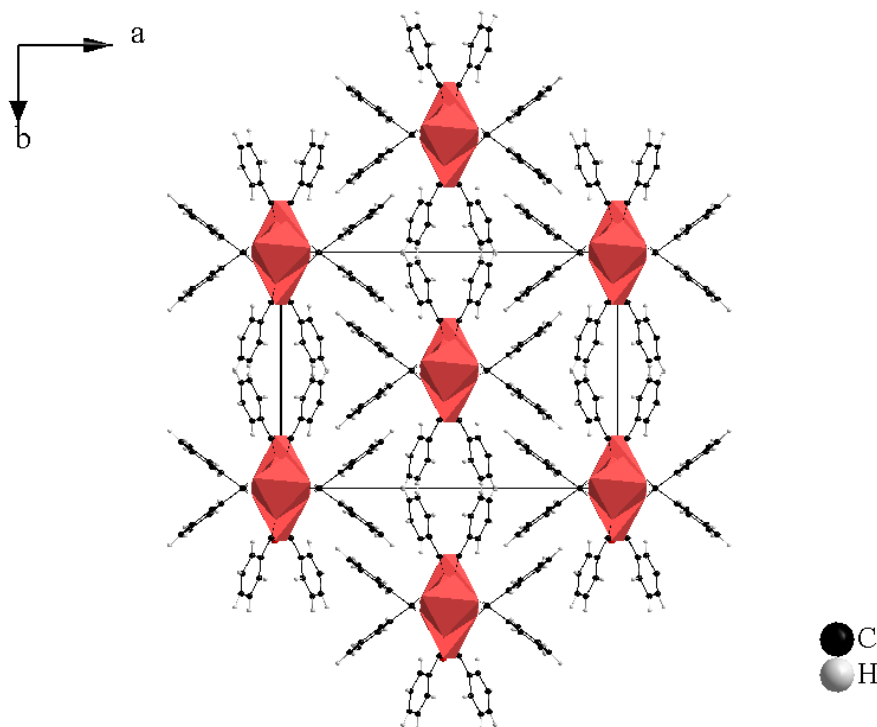


Abb. 72 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang [001] in $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

4.5.2.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 73 gegenübergestellt. Das erhaltene Produkt sieht phasenrein aus.

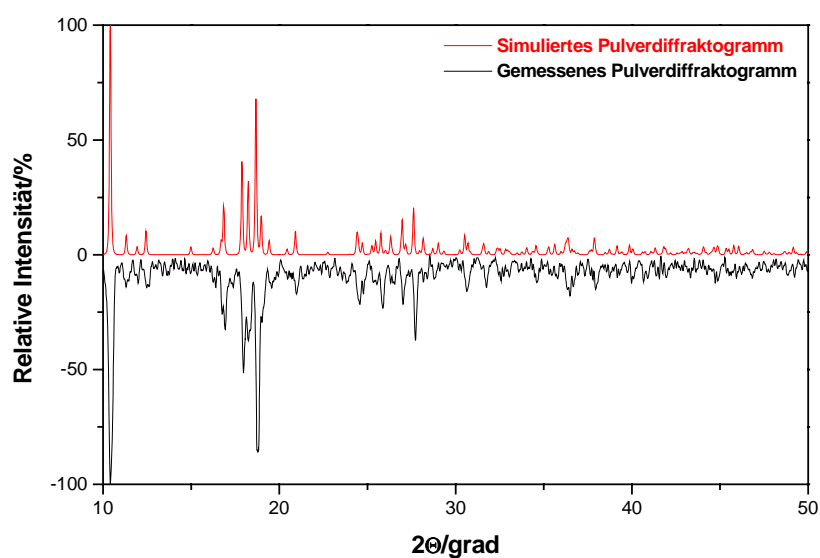


Abb. 73 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

4.5.3 Praseodymbenzoat, $\text{Pr}(\text{OBz})_3$

4.5.3.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Praseodymbenzoat $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ wurde aus der Umsetzung von 140,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Praseodym, 122,1 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure und 138,1 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Salicylsäure erhalten. Das Gemisch wurde 5 Tage bei 160°C erhitzt und 1 Tag bei 100°C getempert.

Die Verbindung kristallisiert in Form von grünen Nadeln aus einer gelblichen, viskosen Schmelze. Das Praseodymbenzoat war das einzige kristalline Produkt dieses Ansatzes, womit das möglicherweise entstandene Praseodymsalicylat bzw. die eingesetzte Salicylsäure in der gelblichen Schmelze enthalten sein muss. Für die Röntgenstrukturanalyse wurde ein Einkristall mittels eines viskosen, perfluorierten Lösemittels weitestgehend von der klebrigen Restschmelze getrennt.

$\text{Pr}(\text{OBz})_3$ kristallisiert monoklin in der Raumgruppe $P2_1/c$ (Nr. 14) mit $a = 1944,7(6)$, $b = 1362,0(1)$, $c = 1539,0(1)$ pm, $\beta = 108,4(8)^\circ$, $V = 3866,2(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0288$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 29 zusammengestellt.

Tabelle 29. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von Pr(OBz)₃.

Summenformel	C ₂₁ H ₁₅ O ₆ Pr	Molmasse [g·mol ⁻¹]	504,24
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	5
Strahlung	Mo-K _α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2θ-Bereich (°)	1,91 - 54,78
Indexbereich	-24 ≤ h ≤ 24	Anzahl gemessener Reflexe	53659
	-17 ≤ k ≤ 17	Anzahl unabhängiger Reflexe	8601
	-19 ≤ l ≤ 18	Anzahl beobachteter Reflexe	6735
Scan-Modus	0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 0° 0° ≤ ω ≤ 142°; ψ = 90°	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	Δω = 2°	Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	2,555
Anzahl der Bilder	161	Transmission T _{min} /T _{max}	0,3168/0,6403
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm ³)	0,3·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	P2 ₁ /c (Nr. 14)
a (pm)	1944,7(6)	β (°)	108,4(8)
b (pm)	1362,0(1)		
c (pm)	1539,0(1)		
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	3866,2(5)	Formeleinheiten Z	8
Dichte ρ _{calc} (g·cm ⁻³)	1,733	F(000)	1984
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	507
Gütefaktoren (I>2σ(I))	R ₁ = 0,0288	Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-1,314/1,059
	wR ₂ = 0,0672	Goodness of fit	1,005
Gütefaktoren (alle)	R ₁ = 0,0432	Wichtungsparameter a/b	0,0509/0
	wR ₂ = 0,0816	CCDC-Nummer	653322

$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

Die Kristallstruktur von Pr(OBz)₃ ist aus Ketten aufgebaut, die mit $\varphi_{(Pr1, Pr2, Pr1)} = 163,1(5)$ und $\varphi_{(Pr2, Pr1, Pr2)} = 151,0(2)^\circ$ unsymmetrisch gewellt vorliegen und entlang [001] verlaufen. Sie enthält zwei röntgenographisch unterschiedliche Praseodymlagen mit den Koordinationszahlen acht und neun. Pr1 ist achtfach koordiniert und mit zwei benachbarten Pr2 durch zum einem drei 3Δ,μ₁- und zum anderem ein 2Δ,μ₂- und zwei 3Δ,μ₁-Benzoatanionen verbrückt (Abb. 74).

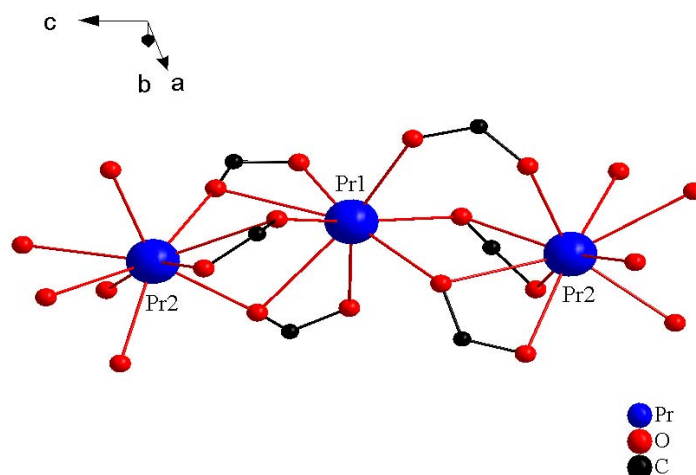


Abb. 74 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Pr^{3+} in $\text{Pr}(\text{OBz})_3$.

Die Pr–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 236,2(3) und 267,7(3) pm mit einem Mittelwert von 250,7 pm. Die Pr–Pr–Abstände liegen im Bereich zwischen 388,2(5) und 409,7(7) pm mit einem Mittelwert von 399,0 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 30 zusammengefasst.

Tabelle 30. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $\text{Pr}(\text{OBz})_3$.

Pr1	O12	236,4(3)	Pr2	O14	236,2(3)
Pr1	O4	241,3(3)	Pr2	O9	243,8(3)
Pr1	O11	242,2(3)	Pr2	O8	243,8(3)
Pr1	O3	243,0(3)	Pr2	O7	247,5(3)
Pr1	O6	244,9(2)	Pr2	O15	249,8(3)
Pr1	O13	249,6(3)	Pr2	O10	255,5(3)
Pr1	O8	264,2(3)	Pr2	O3	264,7(3)
Pr1	O7	265,5(3)	Pr2	O4	266,7(3)
			Pr2	O6	267,7(3)
<hr/>					
<Pr1	O>	248,4	<Pr2	O>	252,9
<Pr1	Pr2>	399,0			

Die Ketten sind in einer AB-Stapelfolge angeordnet, wobei die Kette einer A-Schicht zur benachbarten Kette einer B-Schicht um 180° entlang $[010]$ verdreht ist (Abb.75).

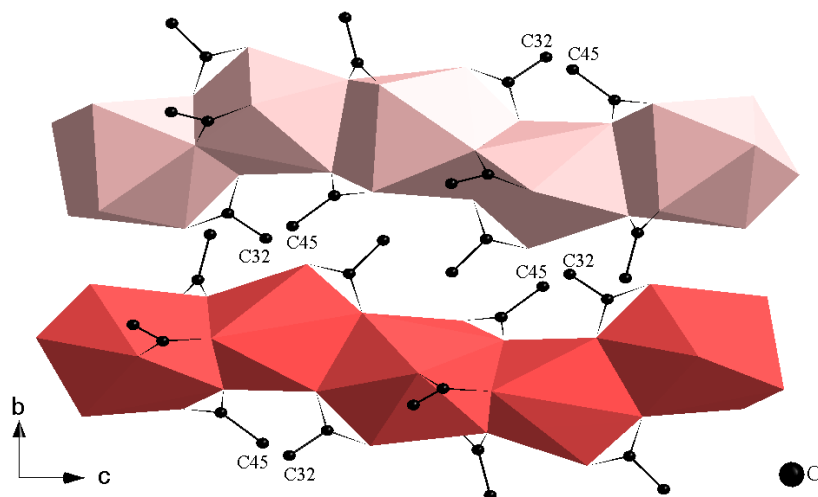


Abb. 75 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten in $\text{Pr}(\text{OBz})_3$.

Jeder Strang ist hexagonal von weiteren Ketten umgeben, wobei der Raum zwischen den Ketten durch die aromatischen Reste der Benzoateinheiten ausgefüllt wird (Abb. 76).

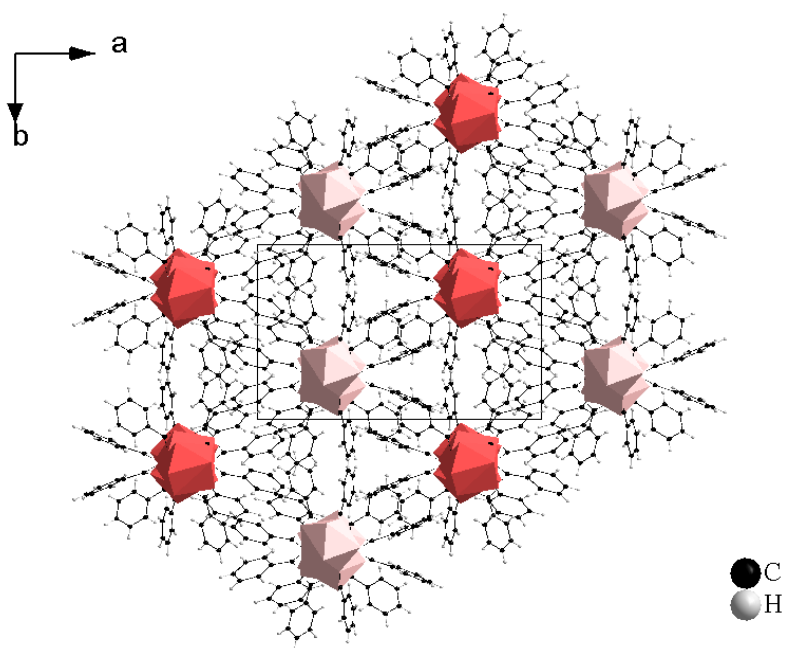


Abb. 76 : Polyedrische Darstellung der EZ entlang $[001]$ in $\text{Pr}(\text{OBz})_3$.

4.5.4 Gadoliniumbenzoat^[21], Gd(Obz)₃

4.5.4.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Gadoliniumbenzoat Gd(Obz)₃ wurde aus der Umsetzung von 157,3 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Gadolinium und 488,2 mg ($4 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure erhalten. Das Gemisch wurde 6½ Tage bei 150°C erhitzt und 1½ Tage bei 100°C getempert. Die Verbindung kristallisiert in Form von farblosen Polyedern.

Gd(Obz)₃ kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe P2₁/n (Nr. 14) mit $a = 1146,9(5)$, $b = 2261,5(4)$, $c = 2278,9(2)$ pm, $\beta = 95,2(9)^\circ$, $V = 5886,1(8) \cdot 10^6$ pm³, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0370$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind der Tabelle 31 entnehmen.

Tabelle 31. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von Gd(Obz)₃.

Summenformel	C ₂₁ H ₁₅ O ₆ Gd	Molmasse [g·mol ⁻¹]	520,58
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	7
Strahlung	Mo-K _α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	150	2θ-Bereich (°)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-14 \leq h \leq 14$	Anzahl gemessener Reflexe	72272
	$-29 \leq k \leq 25$	Anzahl unabhängiger Reflexe	13137
	$-29 \leq l \leq 29$	Anzahl beobachteter Reflexe	8144
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 110^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	3,414
Anzahl der Bilder	145	Transmission T _{min} /T _{max}	0,5030/0,6621
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm ³)	0,3·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	P2 ₁ /n (Nr. 14)
a (pm)	1146,9(5)	β (°)	95,2(9)
b (pm)	2261,5(4)		
c (pm)	2278,9(2)		
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	5886,1(8)	Formeleinheiten Z	12
Dichte ρ_{calc} (g·cm ⁻³)	1,762	F(000)	3036
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	759
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0370$	Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-0,980/0,941
	$wR_2 = 0,0834$	Goodness of fit	0,894
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0708$	Wichtungsparemeter a/b	0,0555/0
	$wR_2 = 0,0943$	CCDC-Nummer	653315

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(F_o^2) + (aP)^2 + bP] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Die Struktur von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ enthält drei röntgenographisch unterschiedliche Gadoliniumlagen, die über Benzoateinheiten zu helikalen Ketten entlang $[010]$ verlaufend verbrückt werden. Die Gd1- und Gd2-Polyeder sind kantenverknüpft über zwei gemeinsame Sauerstoffatome, während im Anschluss Gd2- und Gd3-Polyeder eckenverknüpft sind, so dass sich trimere Einheiten ausbilden, die über Benzoatanionen zu Ketten verknüpft sind (Abb. 77).

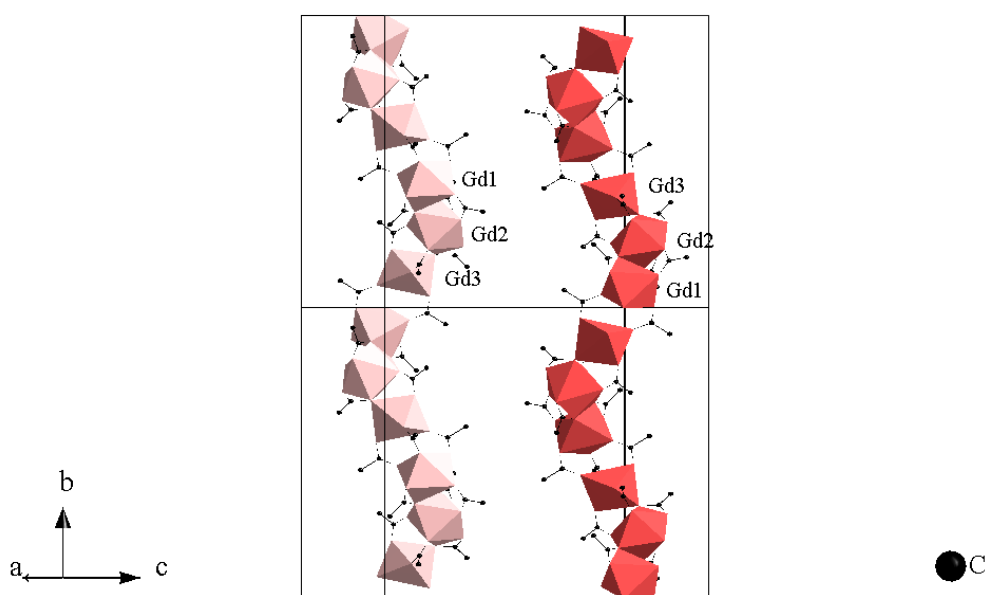


Abb. 77 : Polyedrische Darstellung benachbarter Helices in $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

Wie bereits aus Abb. 77 ersichtlich wird, sind zwei entlang $[001]$ benachbarte Ketten zueinander um 180° entlang $[001]$ verdreht. Man kann sie als links- und rechtsdrehend bezeichnen (Abb. 78).

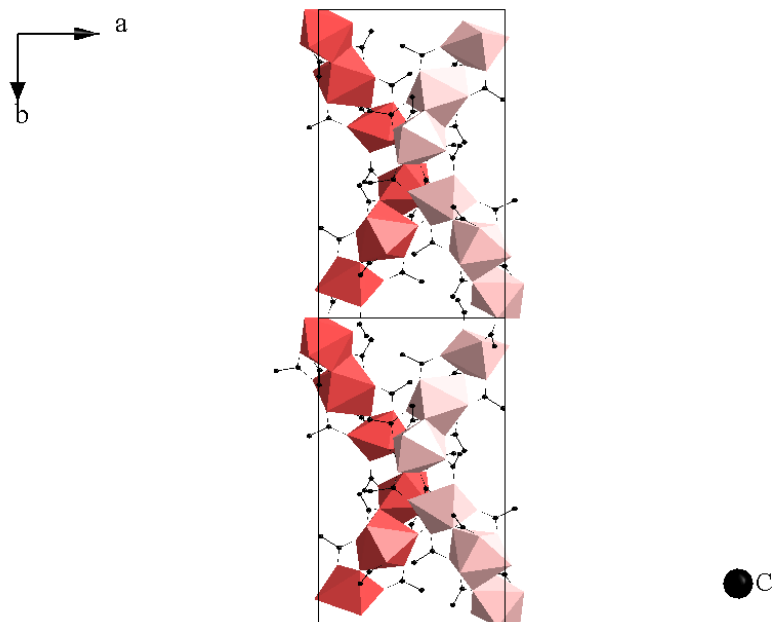


Abb. 78 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten entlang [001] in $\text{Gd}(\text{Obz})_3$.

Gd1 ist siebenfach koordiniert und zu Gd2 über ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Benzoatanionen verbrückt. Gd2 ist achtfach koordiniert und zu Gd3 über ein $3\Delta, \mu_1$ - und zwei $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verknüpft. Gd3 wiederum ist sechsfach koordiniert und zu Gd1 über drei $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt (Abb. 79).

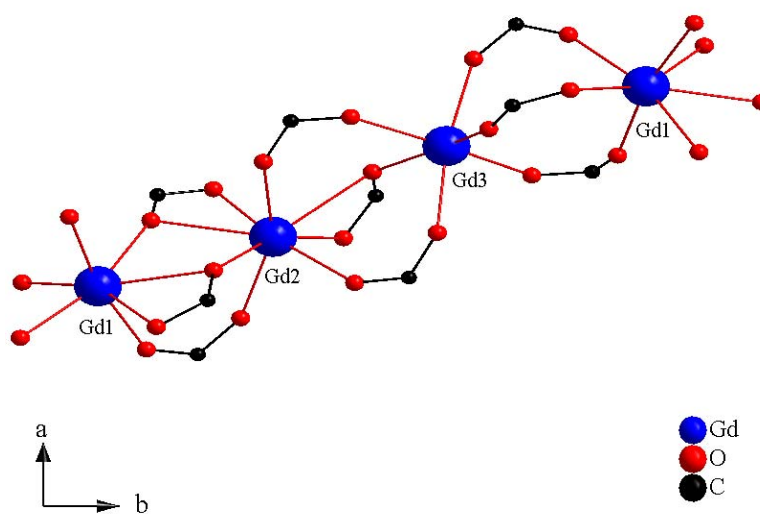


Abb. 79 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Gd^{3+} in $\text{Gd}(\text{Obz})_3$.

Die Gd–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 223,7(5) und 267,2(5) pm mit einem Mittelwert von 235,1 pm. Die Gd–Gd–Abstände liegen im Bereich zwischen 399,6(1) und 457,1(7) pm mit einem Mittelwert von 430,7 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 32 zusammengefasst.

Tabelle 32. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in Gd(OBz)₃.

Gd1	O7	227,1(4)	<Gd1 O>	235,7
Gd1	O13	229,2(4)	Gd1 Gd2	399,6(1)
Gd1	O12	229,7(4)	Gd1 Gd3	457,1(7)
Gd1	O8	232,5(4)		
Gd1	O5	236,3(4)		
Gd1	O10	244,1(4)		
Gd1	O6	251,0(4)		
Gd2	O16	228,0(4)	<Gd2 O>	241,7
Gd2	O19	228,9(4)	Gd2 Gd3	435,4(3)
Gd2	O17	229,7(4)		
Gd2	O6	238,9(4)		
Gd2	O11	242,3(4)		
Gd2	O9	242,6(4)		
Gd2	O5	255,7(4)		
Gd2	O4	267,2(5)		
Gd3	O21	223,7(5)	<Gd3 O>	228,0
Gd3	O15	224,1(4)		
Gd3	O23	225,9(4)		
Gd3	O24	228,1(4)		
Gd3	O20	229,5(4)		
Gd3	O4	236,9(4)		

Die helikalen Stränge liegen in einer hexagonalen Anordnung vor. Der Raum zwischen den Ketten wird durch die aromatischen Reste der Benzoateinheiten ausgefüllt. Die Ketten sind entlang $[100]$ gleichdrehend und entlang $[001]$ in einer AB-Stapelfolge positioniert (Abb. 80).

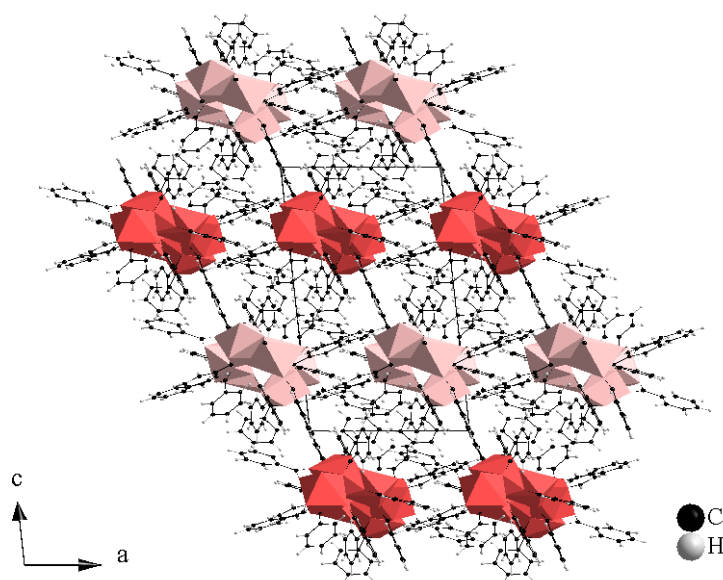


Abb. 80 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang $[010]$ in $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

4.5.4.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 81 gegenübergestellt. Wie aus dem Diffraktogramm ersichtlich wird, enthält das Produkt einen Überschuss an nicht reagierter Benzoesäure. Die restlichen Signale können der Verbindung $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ zugeordnet werden.

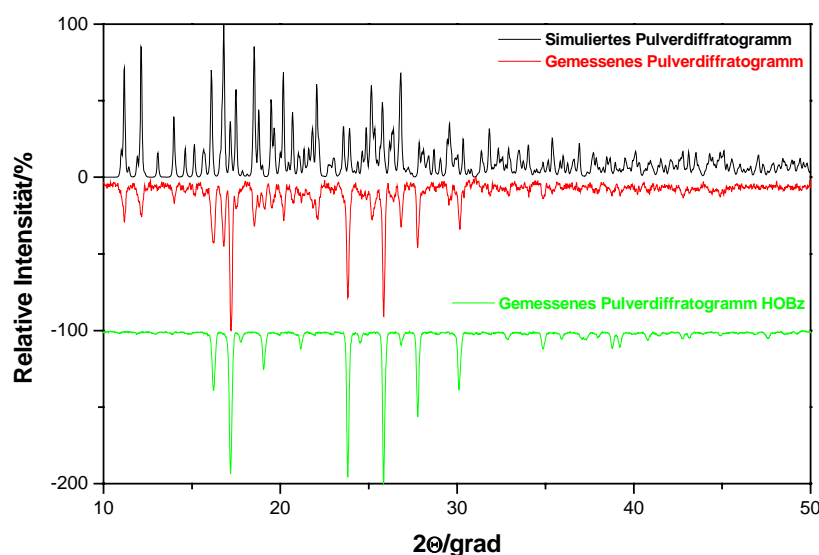


Abb. 81 : Pulverdiffraktogramme von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ (gemessen und simuliert) sowie von Benzoesäure, HOBz.

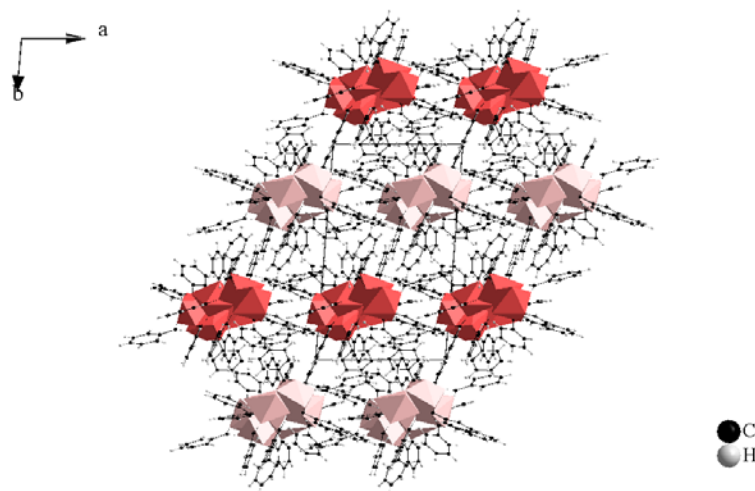
4.5.5 Holmiumbenzoat, $\text{Ho}(\text{OBz})_3$

4.5.5.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Holmiumbenzoat $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ wurde aus der Umsetzung von 164,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Holmium, 244,2 mg ($2 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure und 138,1 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Salicylsäure erhalten. Das Gemisch wurde 5 Tage bei 180°C erhitzt und 2 Tage bei 140°C getempert. Die Verbindung kristallisiert in Form von rosa Polyedern aus einer farblosen, viskosen Schmelze. Das Holmiumbenzoat war das einzige kristalline Produkt dieses Ansatzes, womit das möglicherweise entstandene Holmiumsalicylat bzw. die eingesetzte Salicylsäure in der farblosen Schmelze enthalten sein müssen.

Kristalle von $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ sind triklin, Raumgruppe $\bar{P}1$ (Nr. 2), mit den Kristallparametern $a = 1135,8(4)$, $b = 2276,4(3)$, $c = 2269,3(3)$ pm, $\alpha = 90,4(9)$, $\beta = 90,7(8)$, $\gamma = 93,8(9)^\circ$, $V = 5853,3(12) \cdot 10^6$ pm³, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0741$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 33 zusammengefasst.

Es handelt sich auch bei dieser Struktur wie bei der von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ um helikale Ketten, die entlang $[001]$ verlaufen. $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ enthält jedoch sechs röntgenographisch unterschiedliche Holmiumatome. $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ weist zu $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ ähnliche Strukturmerkmale auf, da es sich ebenfalls um hexagonal angeordnete AB-Stapelschichten handelt, in denen die Ketten A und B zueinander links- und rechtsdrehend sind (Abb. 82).

Abb. 82 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang [010] in Gd(OBz)₃.**Tabelle 33.** Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von Ho(OBz)₃.

Summenformel	C ₂₁ H ₁₅ O ₆ Ho	Molmasse [g·mol ⁻¹]	528,26
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	9
Strahlung	Mo-K _α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2θ-Bereich (°)	1,91 - 54,78
Indexbereich	-14 ≤ h ≤ 14	Anzahl gemessener Reflexe	58810
	-29 ≤ k ≤ 29	Anzahl unabhängiger Reflexe	24765
	-28 ≤ l ≤ 27	Anzahl beobachteter Reflexe	9108
Scan-Modus	0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 0°	Absorptionskorrektur	numerisch
	0° ≤ ω ≤ 104°; ψ = 90°		
Inkrement	Δω = 2°	Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	4,089
Anzahl der Bilder	142	Transmission T _{min} /T _{max}	0,1881/0,5615
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm ³)	0,1·0,1·0,1	Kristallform	Polyeder
Kristallsystem	triklin	Raumgruppe	P $\bar{1}$ (Nr. 2)
a (pm)	1135,8(4)	α (°)	90,4(9)
b (pm)	2276,4(3)	β (°)	90,7(8)
c (pm)	2269,3(3)	γ (°)	93,8(9)
Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	5853,3(12)	Formeleinheiten Z	12
Dichte ρ _{calc} (g·cm ⁻³)	1,798	F(000)	3072
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	1505
Gütefaktoren (I>2σ(I))	R ₁ = 0,0741	Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-2,038/1,693
	wR ₂ = 0,1204	Goodness of fit	0,821
Gütefaktoren (alle)	R ₁ = 0,2037	Wichtungsparameter a/b	0,0294/0
	wR ₂ = 0,1507	CCDC-Nummer	653324

$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

*Wegen vorliegender Fehlbesetzung des Benzolrings an C65 wurden die Abstände zwischen den C-Atomen C163, C153, C162, C169, C168, C167 mit einem Abstand von 144(2) pm für benachbarte C-Atome und von 244(4) für gegenüberliegende C-Atome festgelegt.

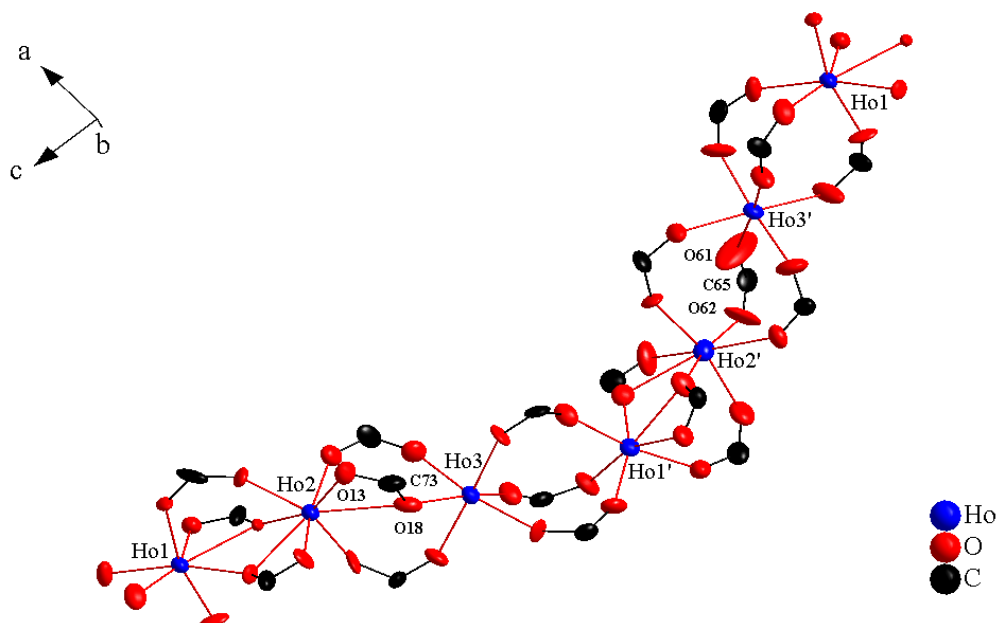


Abb. 83 : Darstellung der Umgebung von Ho^{3+} in $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ mit Schwingungsellipsoiden.

Ho1, Ho2 und Ho3 sind auf die gleiche Weise verknüpft wie Gd1, Gd2 und Gd3 in $\text{Gd}(\text{OBz})_3$. Ho1 ist siebenfach koordiniert und zu Ho2 über ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Benzoatanionen verbrückt. Ho2 ist achtfach koordiniert und zu Ho3 über ein $3\Delta, \mu_1$ - und zwei $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verknüpft. Ho3 wiederum ist sechsfach koordiniert und zu Ho1' über drei $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt. Ho1' und Ho2' sind analog zu Ho1 und Ho2 über ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $3\Delta, \mu_1$ -Benzoatanionen verbrückt, wobei auch hier im Vergleich größere Ellipsoide festzustellen sind. Der Unterschied zwischen der ersten und der zweiten Hälfte der Kette tritt ein zwischen Ho2' und Ho3', die nun über drei $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verknüpft werden. Ho2' ist dadurch nur siebenfach koordiniert. Das Benzoatanion O61–C65–O62 wäre die zum Benzoatanion O13–C73–O18 aus der ersten Hälfte der Kette korrespondierende Einheit und liegt fehlgeordnet vor, was verglichen mit dem Rest der Elementareinheit durch die größeren Ellipsoide zum Ausdruck gebracht wird (Abb. 83).

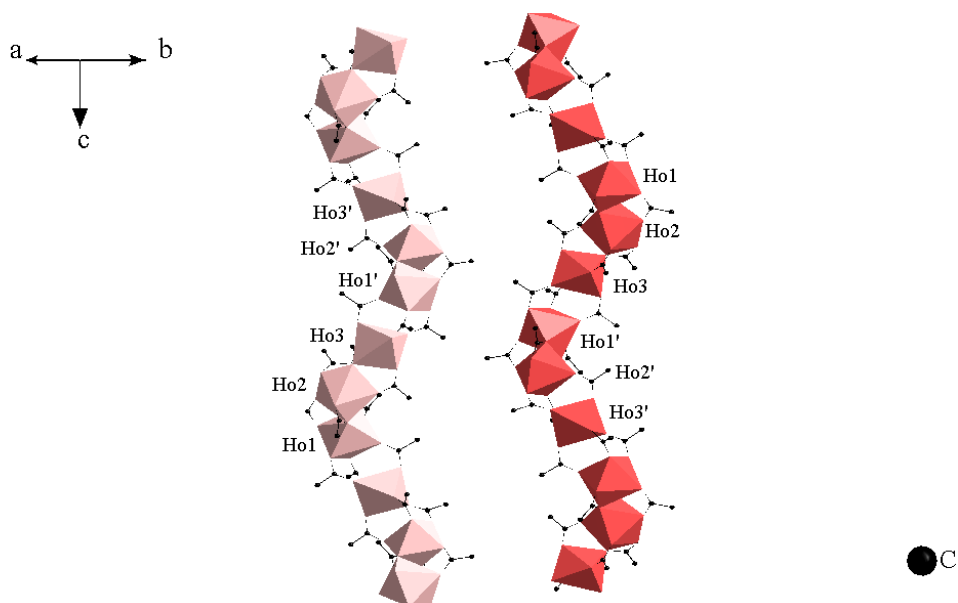


Abb. 84 : Perspektivische Darstellung benachbarter Ketten in $\text{Ho}(\text{OBz})_3$.

Durch die unterschiedlichen Verknüpfungen enthält eine Kette trimere Polyedereinheiten um Ho1, Ho2 und Ho3, daran anknüpfend dimere Polyedereinheiten um Ho1' und Ho2' sowie einen monomeren Polyeder um Ho3' (Abb. 84). Wie aus Abb. 84 ersichtlich wird, sind zwei entlang $[010]$ übereinanderliegende Ketten zueinander um 180° bzgl. $[010]$ verdreht. Man kann sie als links- und rechtsdrehend bezeichnen (Abb. 85).

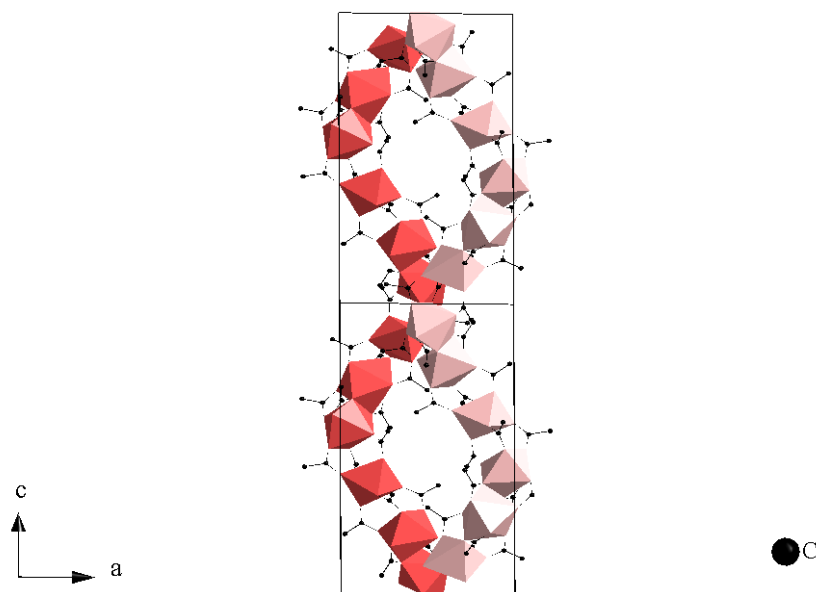


Abb. 85 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang $[010]$ in $\text{Ho}(\text{OBz})_3$.

Die Ho–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 216,8(4) und 264,5(3) pm mit einem Mittelwert von 231,3 pm. Die Ho–Ho–Abstände liegen im Bereich zwischen 390,0(3) und 465,0(5) pm mit einem Mittelwert von 432,3 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 34 zusammengefasst.

Tabelle 34. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in Ho(OBz)₃.

Ho1	O16	222,3(9)	Ho1'	O41	219,7(11)
Ho1	O21	224,1(12)	Ho1'	O33	224,1(12)
Ho1	O32	225,2(14)	Ho1'	O31	225,7(13)
Ho1	O25	226,6(9)	Ho1'	O100	228,8(11)
Ho1	O7	235,2(11)	Ho1'	O12	229,1(15)
Ho1	O8	240,9(13)	Ho1'	O35	240,8(12)
Ho1	O10	246,9(10)	Ho1'	O11	246,0(11)
<Ho1 O>		231,6	<Ho1' O>		230,6
Ho1	Ho2	394,3(4)	Ho1'	Ho2'	390,0(3)
Ho2	O15	223,0(11)	Ho2'	O39	221,6(9)
Ho2	O9	223,5(9)	Ho2'	O14	226,0(13)
Ho2	O20	223,9(13)	Ho2'	O27	226,9(12)
Ho2	O10	233,9(13)	Ho2'	O62	227,7(18)
Ho2	O13	234,1(13)	Ho2'	O11	234,0(14)
Ho2	O37	239,3(13)	Ho2'	O24	239,8(14)
Ho2	O7	249,9(10)	Ho2'	O12	252,6(11)
Ho2	O18	264,5(13)			
<Ho2 O>		236,5	<Ho2' O>		242,5
Ho2	Ho3	430,5(4)	Ho2'	Ho3'	456,9(0)
Ho3	O17	219,1(13)	Ho3'	O29	216,8(14)
Ho3	O28	220,1(13)	Ho3'	O42	220,6(13)
Ho3	O36	222,9(10)	Ho3'	O22	222,0(11)
Ho3	O19	224,3(11)	Ho3'	O40	223,5(11)
Ho3	O23	227,4(9)	Ho3'	O61	224,1(15)
Ho3	O18	233,0(12)	Ho3'	O38	224,8(12)
<Ho3 O>		224,5	<Ho3' O>		222,0
Ho3	Ho1'	457,3(5)	Ho3'	Ho1	465,0(5)

4.5.6 IR- und Ramanspektrum^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Metallkation näher untersucht werden. Da es sich bei den Verbindungen in diesem Kapitel um reine Benzoate handelt, wird repräsentativ das IR- und Ramanspektrum von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ diskutiert (Abb. 86).

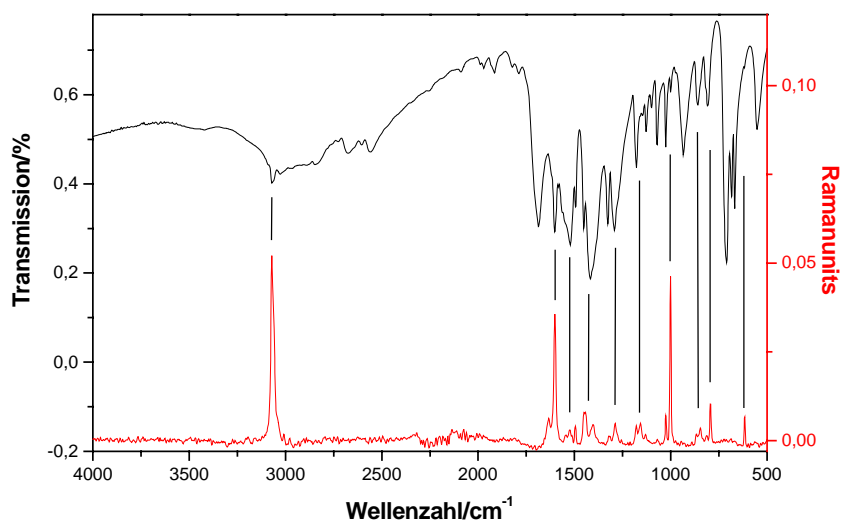


Abb. 86 : IR- und Ramanspektrum von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Benzoat zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 35). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden.

Tabelle 35. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von Gd(OBz)₃.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	~ 3500	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	~ 3022	~ 3070
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	$3022 - 2835$	–
$\nu_{\text{Ober, Kombi}}$	$2678 - 2557$	–
	$2090 - 1789$	–
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~ 1687	–
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	$1600 - 1492$	$1600 - 1494$
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	$1452 - 1415$	$1448 - 1404$
$\nu(\text{C}-\text{O})$	$1326 - 1290$	~ 1288
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	$1180 - 1000$	$1157 - 1001$
$\delta(\text{O}-\text{OH})$	~ 937	–
$\delta(\text{C}-\text{C})$	$856 - 806$	$846 - 792$
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	$709 - 547$	~ 615

4.6 Benzoessäurehaltige Benzoate

4.6.1 Einleitung

Die Benzoat-Benzoessäure-Addukte der Übergangsmetalle mit eingelagerter Benzoessäure sind bisher nur wenig untersucht. Als bekannte Verbindungen dieser Stoffklasse sind zu erwähnen $M_2(OBz)_4(HOBz)_2$ ($M = Cr$ [22], Cu [23], Ru [24]) und $Ru_2(OBz)_5(HOBz)$ [24]. Die Chromverbindung wurde aus Chromocen und Benzoessäure in Toluol in Form von roten Kristallen erhalten. Die Kupferverbindung wurde aus Kupfercarbonat und Benzoessäure in Methanol bei 323 K erhalten. Die Rutheniumverbindungen sind beide bei der Umsetzung von Rutheniumacetylacetonat in einer Schmelze von Benzoessäure bei 150°C entstanden, wobei $Ru_2(OBz)_4(HOBz)_2$ in Form von schwarzen Kristallen und $Ru_2(OBz)_5(HOBz)$ in Form von roten Nadeln erhalten wurden.

Die Verbindung $M_2(OBz)_4(HOBz)_2$ ($M = Cr, Cu, Ru$) kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $P2_1/n$. Die Kristallstruktur besteht aus dimeren Baueinheiten. Die Metallatome werden von vier $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt, wobei zusätzlich noch ein Benzo Säuremolekül an jedes Metallatom koordiniert.

Das Rutheniumbenzoat $Ru_2(OBz)_5(HOBz)$ kristallisiert in der triklinen Raumgruppe $P\bar{1}$. Die Verbindung enthält eine Kettenstruktur bestehend aus dimeren Kationen $[Ru_2(OBz)_4]^+$, die über ein Benzoatanion verbrückt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit konnten weitere Benzoat-Benzoessäure-Addukte gewonnen werden, in denen Benzo Säuremoleküle eingelagert sind. Dazu zählen das Manganbenzoat $Mn(OBz)_2(HOBz)_{2/7}$, das Praseodymbenzoat $Pr(OBz)_3(HOBz)_2$ sowie die beiden Europiumbenzoate $Eu(OBz)_{2,5}(HOBz)$ und $Eu(OBz)_3(HOBz)_{0,5}$. Alle Verbindungen enthalten Kettenstrukturen, die über Wasserstoffbrückenbindungen der Benzo Säuremoleküle mit verbrückenden Benzoatanionen zusätzlich stabilisiert werden. Das Koordinationspolymer $Eu(OBz)_{2,5}(HOBz)$ ist eine gemischtvalente Verbindung, die Eu^{2+} und Eu^{3+} enthält.

4.6.2 Manganbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$

4.6.2.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Manganbenzoat $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ ist bei der Umsetzung von 54,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Mangan und 366,2 mg ($3 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure entstanden. Das Gemisch wurde zunächst 5 Tage bei 160°C erhitzt und einer Temperung von jeweils 2 Tagen bei 140°C und von bei 80°C ausgesetzt. Die Verbindung kristallisiert in Form von rosa Nadeln.

$\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ kristallisiert triklin in der Raumgruppe $\bar{P}1$ (Nr. 2) mit $a = 1394,7(7)$, $b = 1409,3(5)$, $c = 1541,3(2)$ pm, $\alpha = 105,7(4)$, $\beta = 99,7(4)$, $\gamma = 109,3(8)^\circ$, $V = 2636,5(6) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 1$ und $R_1 = 0,0395$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 36 zusammengestellt.

Tabelle 36. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Summenformel	$\text{C}_{16}\text{H}_{11,71}\text{O}_{4,57}\text{Mn}$	Molmasse [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$]	332,05
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	14
Strahlung	Mo-K α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-17 \leq h \leq 16$ $-18 \leq k \leq 18$ $-19 \leq l \leq 19$	Anzahl gemessener Reflexe	40823
		Anzahl unabhängiger Reflexe	11646
		Anzahl beobachteter Reflexe	6106
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 172^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	0,892
Anzahl der Bilder	176	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,7857/0,9161
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,3·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	triklin	Raumgruppe	$\bar{P}1$ (Nr. 2)
a (pm)	1394,7(7)	α ($^\circ$)	105,7(4)
b (pm)	1409,3(5)	β ($^\circ$)	99,7(4)
c (pm)	1541,3(2)	γ ($^\circ$)	109,3(8)
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	2636,5(6)	Formeleinheiten Z	7
Dichte ρ_{calc} ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	1,464	F(000)	1185
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	685
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0395$ $wR_2 = 0,0539$	Restelektronendichte ($10^6 \text{e} \cdot \text{pm}^{-3}$)	-0,563/0,422
		Goodness of fit	0,809
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,1060$ $wR_2 = 0,0648$	Wichtungsparameter a/b	0,0126/0
		CCDC-Nummer	653319

$R_1 = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

Kristalle von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ bauen eine Kettenstruktur entlang [100] auf, bestehend aus sechs über unterschiedliche Benzoateinheiten verknüpfte Manganringe, die über ein Mn4 verbrückt werden. Die Ketten liegen versetzt zueinander vor, so dass sie eine dichteste Packung ausbilden können (Abb. 87).

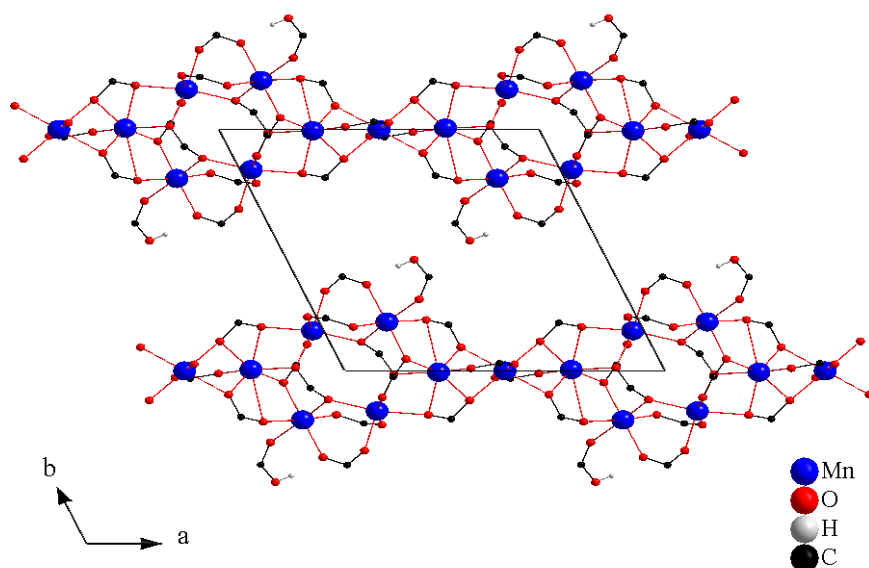


Abb. 87 : Perspektivische Darstellung benachbarter Ketten in $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

$\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ enthält insgesamt vier röntgenographisch unterschiedliche, sechsfach koordinierte Manganatomen, wobei Mn1, Mn2 und Mn3 innerhalb des Rings liegen und Mn4 die Ringe entlang [100] verknüpft. Die MnO_6 -Polyeder um Mn3 sind mit denen um Mn1, Mn2 und Mn4 über Kanten verknüpft, während die MnO_6 -Polyeder um Mn1 und Mn2 über Ecken verknüpft vorliegen. Die Benzoessäuremoleküle koordinieren ausschließlich an Mn2 in gegenüberliegenden Positionen im Ring (Abb. 88).

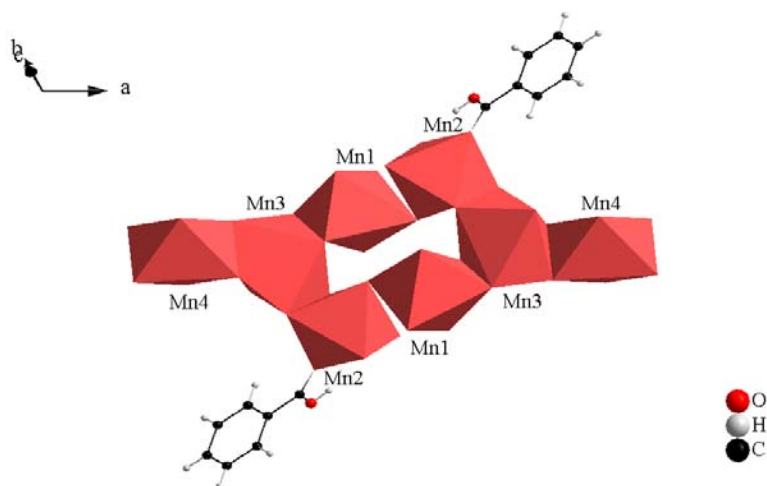


Abb. 88 : Polyedrische Darstellung eines Manganringes in $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Das Verknüpfungsmuster ist recht komplex und enthält Verbrückungen nicht nur zwischen benachbarten Manganatomen sondern auch zu allen umgebenden Manganatomen im Ring. Mn4 ist mit Mn3 über ein $2\Delta, \mu_2$ - und zwei $4\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt, wobei die beiden $4\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen chelatisierend an Mn3 koordinieren und dieses weiter zu benachbarten Mn1 und Mn2 verknüpft. Mn3 ist zusätzlich über ein $3\Delta, \mu_2, \mu_1'$ - und ein $4\Delta, \mu_2, \mu_2'$ -Benzoatanionen mit Mn1 und Mn2 verbrückt, wobei das $4\Delta, \mu_2, \mu_2'$ -Benzoatanion die drei Manganatome weiter zum nächsten Mn1 im Ring verknüpft. Mn1 und Mn2 sind zusätzlich über zwei $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt. Die an Mn2 koordinierenden Benzoessäuremoleküle bilden Wasserstoffbrücken zu einem der beiden $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen aus (Abb. 89).

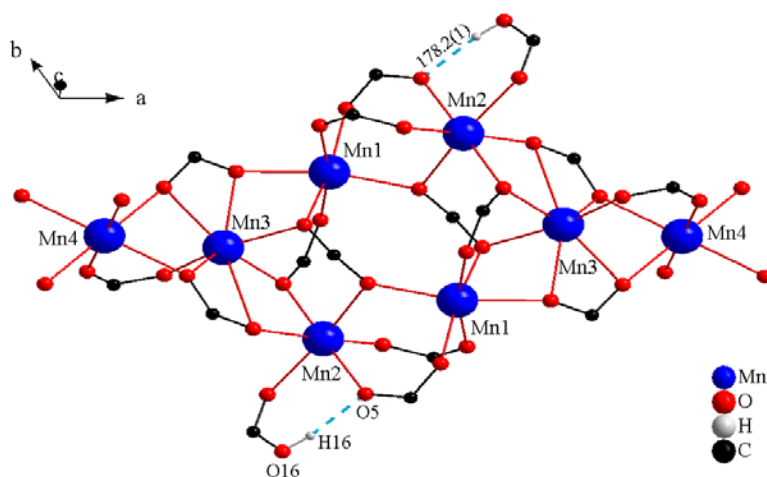


Abb. 89 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Mn^{2+} in $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Die Mn–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 207,0(2) und 233,2(2) pm mit einem Mittelwert von 218,8 pm. Die Mn–Mn–Abstände liegen im Bereich zwischen 330,2(4) und 355,0(1) pm mit einem Mittelwert von 342,4 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 37 zusammengefasst.

Tabelle 37. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Mn1	O17	212,8(2)	<Mn1 O>	219,0
Mn1	O7	215,7(2)	Mn1 Mn2	355,0(1)
Mn1	O8	218,1(2)	Mn1 Mn3	333,1(1)
Mn1	O14	219,5(2)		
Mn1	O10	221,5(2)		
Mn1	O12	226,7(2)		
Mn2	O20	208,2(2)	<Mn2 O>	217,8
Mn2	O6	217,6(2)	Mn2 Mn3	351,2(7)
Mn2	O9	219,1(2)		
Mn2	O5	220,0(2)		
Mn2	O15	220,1(2)		
Mn2	O8	222,1(2)		
O16H16	O5	178,2(1)		
Mn3	O18	209,5(2)	<Mn3 O>	221,0
Mn3	O6	212,2(2)	Mn3 Mn4	330,2(4)
Mn3	O13	213,5(2)		
Mn3	O10	225,5(2)		
Mn3	O11	232,3(2)		
Mn3	O12	233,2(2)		
2xMn4	O19	207,0(2)	<Mn4 O>	217,5
2xMn4	O11	219,3(2)		
2xMn4	O13	226,4(2)		

Die Ketten sind leicht wellenförmig, wobei sämtlicher Raum zwischen den Ketten durch die aromatischen Reste der Benzoatanionen ausgefüllt wird (Abb. 90).

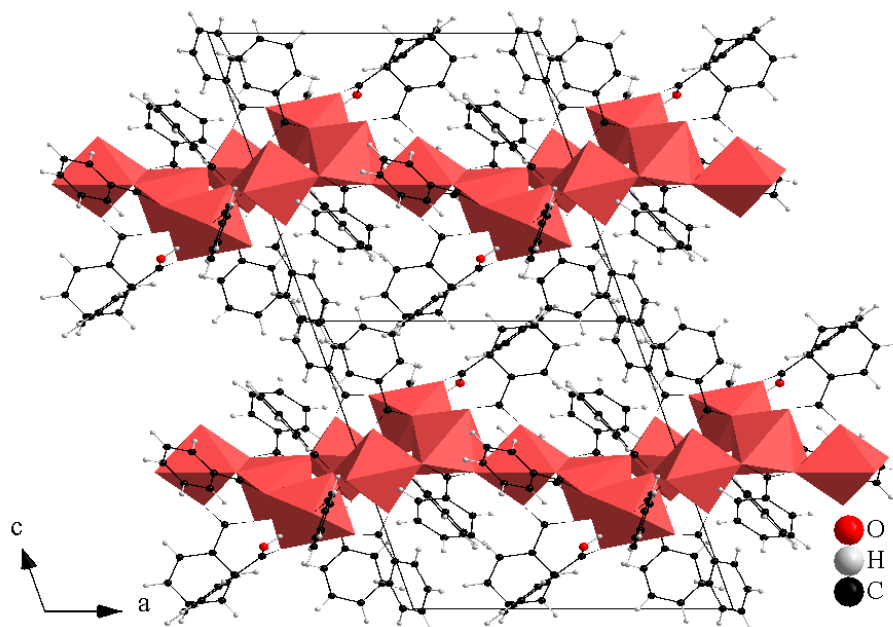


Abb. 90 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang $[010]$ in $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

4.6.2.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 91 gegenübergestellt. Wie aus dem Diffraktogramm ersichtlich wird, enthält das Produkt einen Überschuss an nicht reagierter Benzoesäure. Außerdem kann festgestellt werden an der Intensitätsschwäche und Breite der restlichen Signale, die der Verbindung $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ zugeordnet werden können, dass die Probe keine gute Kristallinität aufweist.

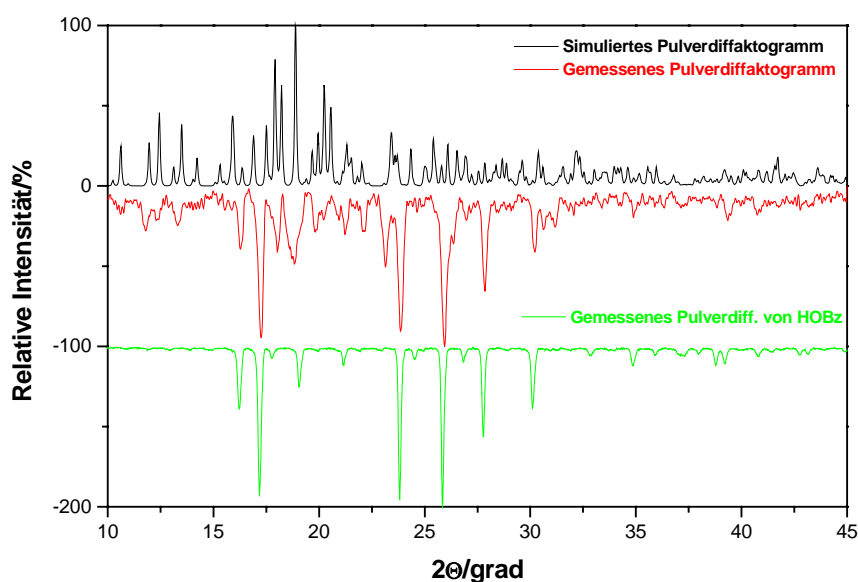


Abb. 91 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ (gemessen und simuliert) und von Benzoesäure, HOBz.

4.6.3 Praseodymbenzoat-Benzoesäure-Addukt^[25, 26], Pr(OBz)₃(HOBz)₂

4.6.3.1 Synthese und Kristallstruktur

Das Praseodymbenzoat Pr(OBz)₃(HOBz)₂ ist bei der Umsetzung von 140,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Praseodym und 610,3 mg ($5 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure entstanden. Das Gemisch wurde 8 Tage bei 200°C erhitzt und 3 Tage bei 100°C getempert. Die Verbindung kristallisiert in Form von hellgrünen Nadeln.

Pr(OBz)₃(HOBz)₂ kristallisiert orthorhombisch, in der Raumgruppe Pcn (Nr. 52) mit $a = 975,4(7)$, $b = 2485,9(1)$, $c = 2653,1(4)$ pm, $V = 6433,7(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 8$ und $R_1 = 0,0588$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 38 wiederzufinden.

Tabelle 38. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von Pr(OBz)₃(HOBz)₂.

Summenformel	C ₃₅ H ₂₇ O ₁₀ Pr	Molmasse [g·mol ⁻¹]	748,48
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	8
Strahlung	Mo-K _α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ Bereich (°)	1,91 - 54,78
Indexbereich	-12 ≤ h ≤ 11	Anzahl gemessener Reflexe	97702
	-31 ≤ k ≤ 31	Anzahl unabhängiger Reflexe	7106
	-33 ≤ l ≤ 34	Anzahl beobachteter Reflexe	4199
Scan-Modus	0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 0° 0° ≤ ω ≤ 180°; ψ = 90°	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	Δω = 1°	Absorptionskoeffizient μ (mm ⁻¹)	1,572
Anzahl der Bilder	360	Transmission T _{min} /T _{max}	0,6533/0,8471
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm ³)	0,5·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	orthorhombisch	Raumgruppe	Pcn (Nr. 52)
a (pm)	975,4(7)	Zellvolumen (10 ⁶ ·pm ³)	6433,7(5)
b (pm)	2485,9(1)	Formeleinheiten Z	8
c (pm)	2653,1(4)		
Dichte ρ _{calc} (g·cm ⁻³)	1,545	F(000)	3008
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	421
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0588$ $wR_2 = 0,1580$	Restelektronendichte (10 ⁶ e·pm ⁻³)	-1,697/0,884
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0900$	Goodness of fit	1,031
	$wR_2 = 0,1740$	Wichtungsfaktor a/b	0,0972/0
		CCDC-Nummer	602887

$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|$, $wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}$, $S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}$, mit $w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + bP]$ und $P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3$. $F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$.

$\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ kristallisiert in einer Kettenstruktur. Die Ketten verlaufen entlang [100]. Sie enthalten nur eine achtfach koordinierte Praseodymlage. Die Praseodymatome werden über insgesamt sechs $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt, wobei zusätzlich zwei Benzoesäuremoleküle an jedes Metallatom koordinieren und mit benachbarten $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen Wasserstoffbrücken ausbilden (Abb. 92).

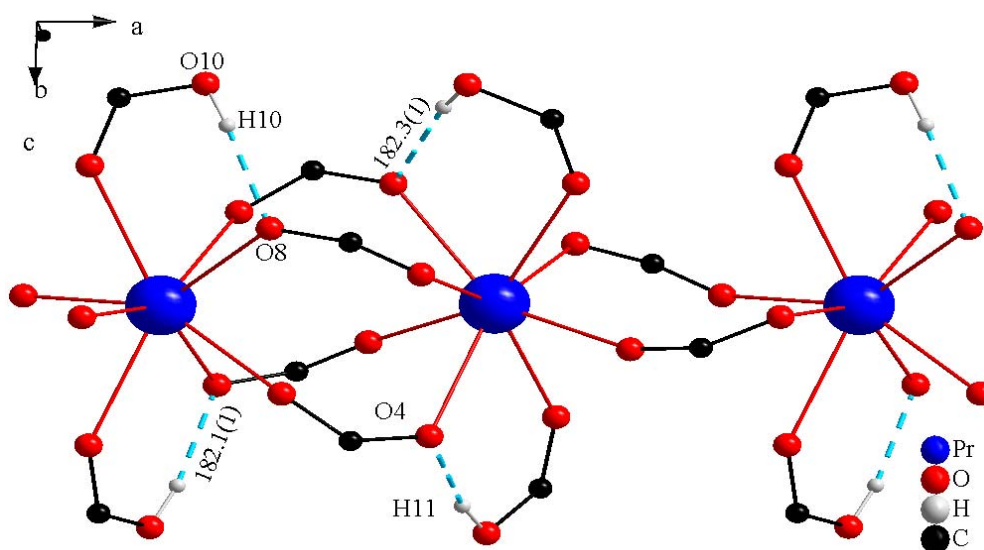


Abb. 92 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Pr^{3+} in $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

Die Ketten sind nahezu linear mit $\varphi(\text{Pr1}, \text{Pr1}, \text{Pr1}) = 177,9(3)^\circ$. Die Pr–O–Abstände liegen im Bereich zwischen 234,7(3) und 256,8(3) pm mit einem Mittelwert von 246,4 pm. Die Pr–Pr–Abstände liegen im Bereich zwischen 467,0(2) und 508,6(1) pm mit einem Mittelwert von 487,8 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 39 zusammengefasst.

Tabelle 39. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte in $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

Pr	O2	234,7(3)	<Pr O>	246,4
Pr	O5	237,6(4)	<Pr Pr>	487,8
Pr	O6	242,0(3)		
Pr	O3	242,6(3)		
Pr	O8	248,6(4)		
Pr	O7	254,4(3)		
Pr	O9	254,4(4)		
Pr	O4	256,8(3)		
<hr/>				
O10H10	O8	182,3(1)		
O11H11	O4	182,0(1)		

Die Ketten sind in einer hexagonalen AB-Stapelfolge angeordnet, wobei Zwischenräume durch die aromatischen Reste der Benzoatanionen ausgefüllt werden (Abb. 93).

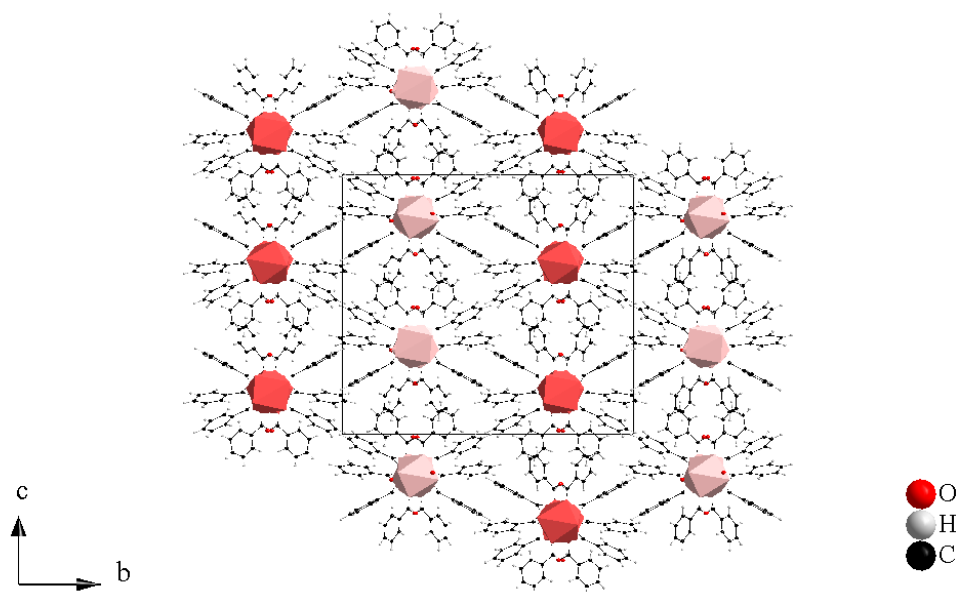


Abb. 93 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang [100] in $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

Entlang [001] gleiche benachbarte Ketten sind zueinander um 180° bzg. [001] verdreht (Abb. 94), also gegenläufig.

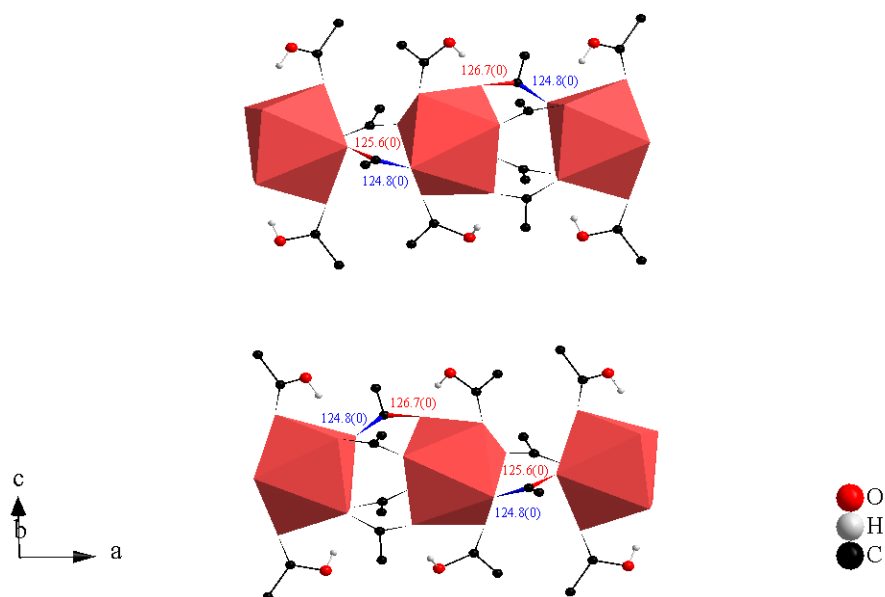


Abb. 94 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten entlang [001] in $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

Zwei entlang [010] benachbarte Ketten sind zueinander um 180° bzg. [100] verdreht (Abb. 95), also spiegelbildlich.

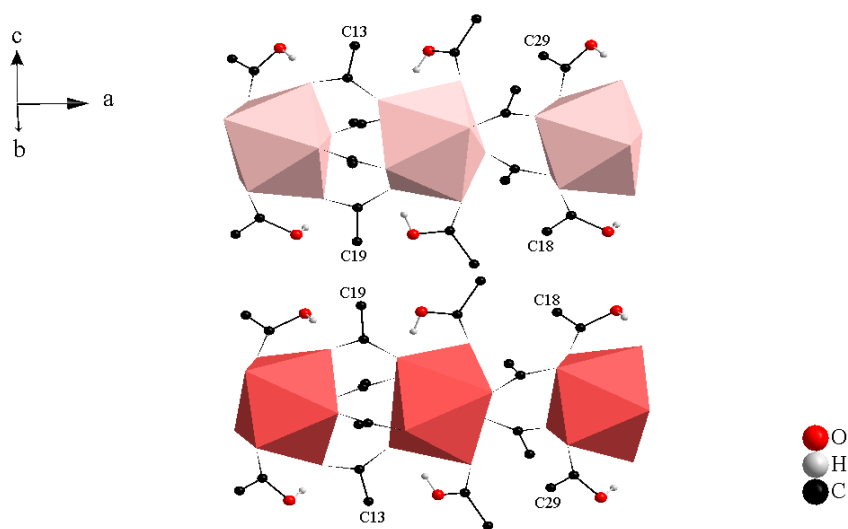


Abb. 95 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten entlang [010] in $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

4.6.3.2 Pulverdiffraktogramm

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 96 gegenübergestellt. Die Verbindung scheint keine überschüssige Benzoesäure zu enthalten. Der störende Untergrund kann apparative Gründe haben oder durch eine teils schlechte Kristallinität der Probe verursacht werden.

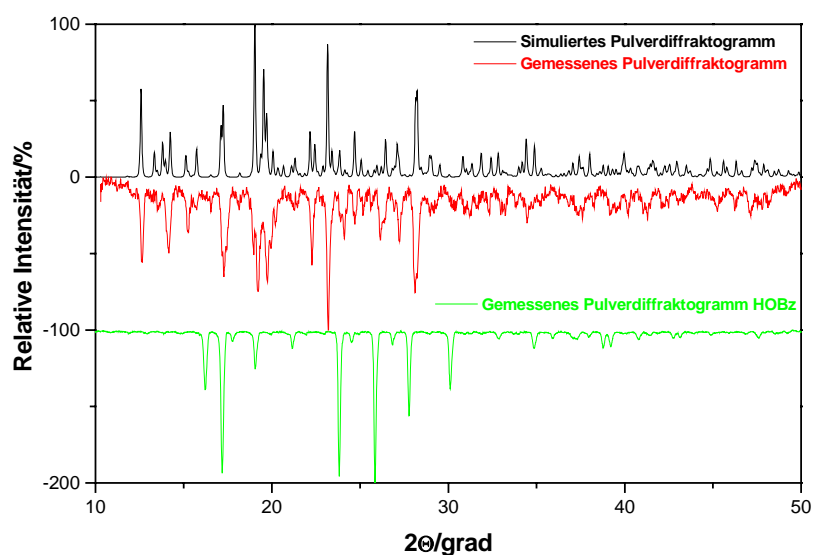


Abb. 96 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ (simuliert und gemessen) und Benzoesäure, HOBz.

4.6.4 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukte ^[27, 28], $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$

4.6.4.1 Synthese und Kristallstrukturen

Die Europiumbenzoate $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ sind bei Versuchen mit unterschiedlichen molaren Verhältnissen der Edukte entstanden. Das gemischtvalente Europiumbenzoat $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ ist bei der Umsetzung von 151,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Europium und 244,1 mg ($2 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure in Form oranger Nadeln erhalten worden. Das Gemisch wurde 8 Tage bei 130°C erhitzt. Das Europiumbenzoat $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ wurde bei der Umsetzung von 151,9 mg ($1 \cdot 10^{-3}$ mol) Europium und 488,2 mg ($4 \cdot 10^{-3}$ mol) Benzoesäure in Form gelber Nadeln gewonnen. Das Gemisch wurde 5 Tage bei 180°C erhitzt und 2 Tage bei 100°C getempert.

$\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ kristallisiert monoklin in der Raumgruppe $P2_1/c$ (Nr. 14) mit $a = 703,9(1)$, $b = 2850,7(3)$, $c = 2268,8(3)$ pm, $\beta = 92,5(5)^\circ$, $V = 4548,1(9) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0529$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 40 zusammengestellt.

$\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ kristallisiert in einer Kettenstruktur, deren Stränge entlang $[100]$ verlaufen und mit $\varphi(\text{Eu1}, \text{Eu2}, \text{Eu1}) = 145,6(1)^\circ$ wellenförmig sind. Sie enthält zwei röntgenographisch unterschiedliche Europiumlagen. Eu1 ist von acht Sauerstoffatomen umgeben, von denen zwei den beiden Benzoesäuremolekülen angehören. Eu2 ist von zehn Sauerstoffatomen umgeben und zu zwei benachbarten Eu1 über fünf $3\Delta, \mu_1$ -Benzoatanionen verbrückt. Die Benzoesäuremoleküle üben zu zwei dieser $3\Delta, \mu_1$ -Benzoatanionen Wasserstoffbrücken aus (Abb. 97).

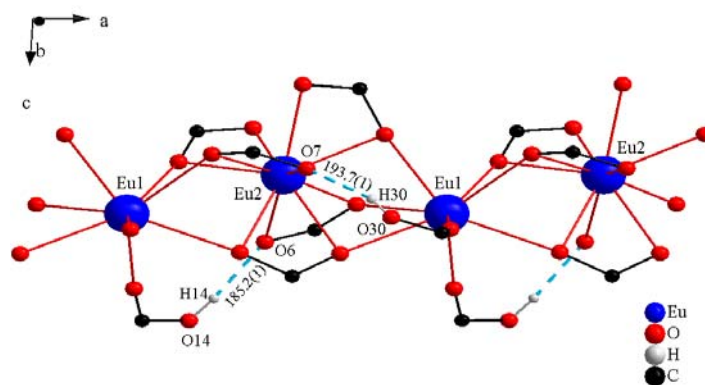


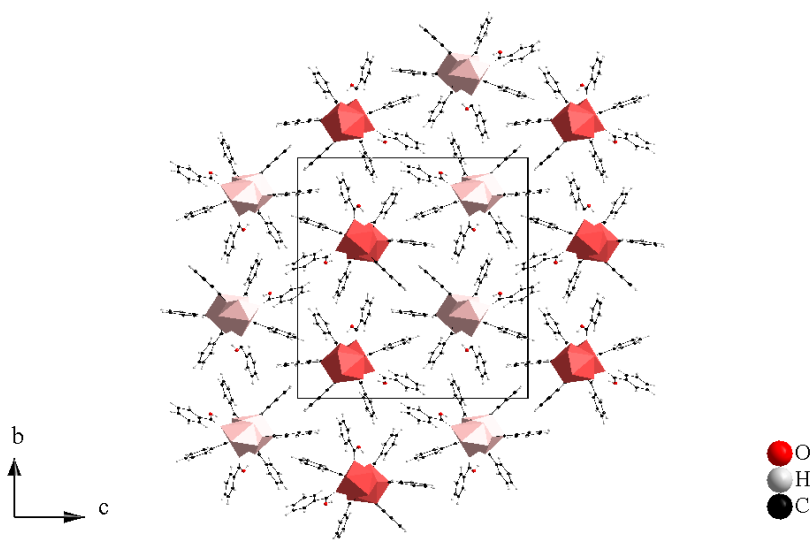
Abb. 97 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Eu1 und Eu2 in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Tabelle 40. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Summenformel	$\text{C}_{24,5}\text{H}_{18,5}\text{O}_7\text{Eu}$	Molmasse [$\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$]	576,85
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	15
Strahlung	Mo- K_α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-7 \leq h \leq 8$	Anzahl gemessener Reflexe	30065
	$-33 \leq k \leq 33$	Anzahl unabhängiger Reflexe	7960
	$-26 \leq l \leq 26$	Anzahl beobachteter Reflexe	3916
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 96^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	2,800
Anzahl der Bilder	138	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,5458/0,7601
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,5·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	monoklin	Raumgruppe	$\text{P2}_1/\text{n}$ (Nr. 14)
a (pm)	703,9(1)	β ($^\circ$)	92,5(5)
b (pm)	2850,7(3)		
c (pm)	2268,8(3)		
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	4548,1(9)	Formeleinheiten Z	8
Dichte ρ_{calc} ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)	1,685	F(000)	2276
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	590
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0529$	Restelektronendichte ($10^6 \text{ e}\cdot\text{pm}^{-3}$)	-1,471/1,308
	$wR_2 = 0,1013$	Goodness of fit	0,833
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,1316$	Wichtungsparameter a/b	0,0467/0
	$wR_2 = 0,1266$	CCDC-Nummer	653312

$$R_1 = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + b \cdot P] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Die Ketten sind in einer hexagonalen Stabpackung entlang [001] angeordnet (Abb. 98).

**Abb. 98 :** Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang [100] in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Zwei entlang $[010]$ benachbarte Ketten einer Schicht sind zueinander um 180° bzg. $[010]$ verdreht (Abb. 99).

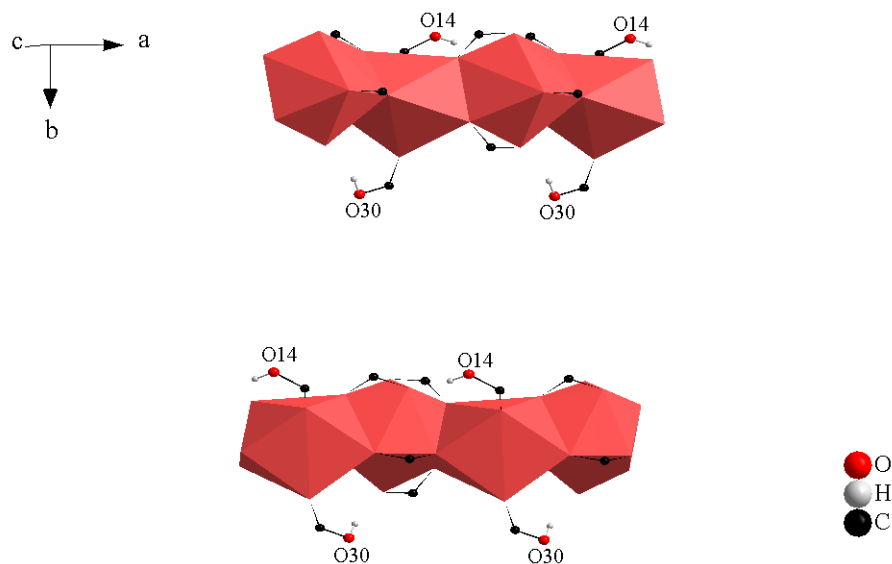


Abb. 99 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten einer Schicht in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2.5}(\text{HOBz})$.

Zwei entlang $[001]$ benachbarte Ketten unterschiedlicher Schichten sind um 180° um $[010]$ und zusätzlich noch um 180° bzg. $[100]$ zueinander verdreht (Abb. 100).

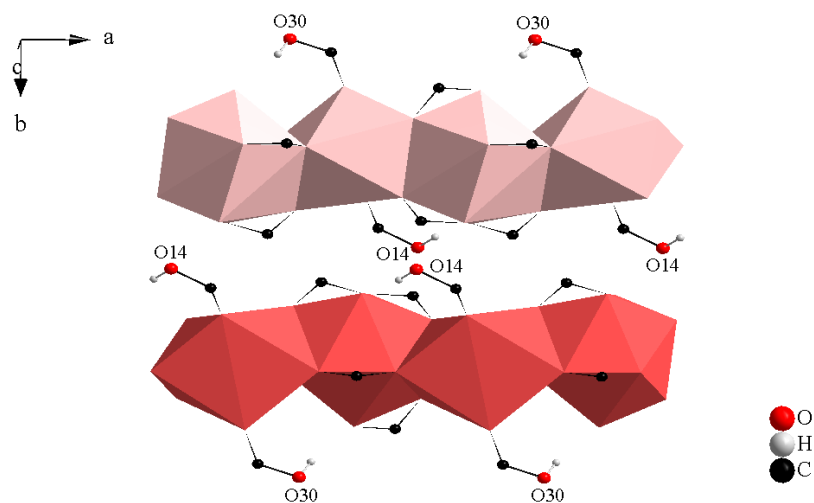


Abb. 100 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten zweier Schichten in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2.5}(\text{HOBz})$.

$\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ kristallisiert triklin in der Raumgruppe $\bar{P}1$ (Nr. 2) mit $a = 1381,8(5)$, $b = 1373,5(7)$, $c = 1470,5(4)$ pm, $\alpha = 67,4(7)$, $\beta = 64,3(3)$, $\gamma = 66,7(3)^\circ$, $V = 2233,9(5) \cdot 10^6 \cdot \text{pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0333$ [$I > 2\sigma(I)$]. Einzelheiten zur Strukturbestimmung sind in Tabelle 41 zusammengestellt.

Tabelle 41. Kristallographische Daten und Angaben zur Strukturbestimmung und -verfeinerung von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$.

Summenformel	$\text{C}_{24,5}\text{H}_{18}\text{O}_7\text{Eu}$	Molmasse [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$]	576,35
<i>Messdaten</i>			
Diffraktometer	IPDS II	Belichtungszeit (min)	6
Strahlung	Mo- K_α	Detektorabstand (mm)	120
Temperatur (K)	170	2 θ -Bereich ($^\circ$)	1,91 - 54,78
Indexbereich	$-17 \leq h \leq 18$	Anzahl gemessener Reflexe	28612
	$-17 \leq k \leq 16$	Anzahl unabhängiger Reflexe	9888
	$-18 \leq l \leq 18$	Anzahl beobachteter Reflexe	6294
Scan-Modus	$0^\circ \leq \omega \leq 180^\circ$; $\psi = 0^\circ$ $0^\circ \leq \omega \leq 112^\circ$; $\psi = 90^\circ$	Absorptionskorrektur	numerisch
Inkrement	$\Delta\omega = 2^\circ$	Absorptionskoeffizient μ (mm^{-1})	2,851
Anzahl der Bilder	146	Transmission T_{\min}/T_{\max}	0,5432/0,7196
<i>Kristallographische Daten</i>			
Kristallgröße (mm^3)	0,3·0,1·0,1	Kristallform	Nadel
Kristallsystem	triklin	Raumgruppe	$\bar{P}1$ (Nr. 2)
a (pm)	1381,8(5)	α ($^\circ$)	67,4(7)
b (pm)	1373,5(7)	β ($^\circ$)	64,3(3)
c (pm)	1470,5(4)	γ ($^\circ$)	66,7(3)
Zellvolumen ($10^6 \cdot \text{pm}^3$)	2233,9(5)	Formeleinheiten Z	4
Dichte ρ_{calc} ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	1,714	F(000)	1136
<i>Kristallstrukturanalyse und -verfeinerung</i>			
Strukturverfeinerung	SHELXL-97	Zahl der Variablen	590
Gütefaktoren ($I > 2\sigma(I)$)	$R_1 = 0,0333$	Restelektronendichte ($10^6 \cdot \text{e} \cdot \text{pm}^{-3}$)	-1,857/1,571
	$wR_2 = 0,0638$	Goodness of fit	0,872
Gütefaktoren (alle)	$R_1 = 0,0668$	Wichtungsparameter a/b	0,0348/0
	$wR_2 = 0,0719$	CCDC-Nummer	653326

$$R_1 = \sum |F_o| - |F_c| / \sum |F_o|, wR_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / \sum w (|F_o|^2)^2]^{1/2}, S_2 = [\sum w (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2 / (n-p)]^{1/2}, \text{ mit } w = 1 / [\sigma^2(|F_o|^2) + (aP)^2 + b \cdot P] \text{ und } P = (|F_o|^2 + 2|F_c|^2)/3. F_c^* = k F_c [1 + 0,001 \cdot |F_c|^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}.$$

Kristalle von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ enthalten Ketten, die mit $\varphi(\text{Eu1}, \text{Eu1}, \text{Eu2}) = 163,7(4)$ und $\varphi(\text{Eu2}, \text{Eu2}, \text{Eu1}) = 116,2(3)^\circ$ unsymmetrisch gewellt vorliegen und entlang [010] leicht versetzt zueinander verlaufen. Die Ketten bestehen aus tetrameren Polyedereinheiten, die über Benzoationen verbrückt werden. Der Zwischenraum wird durch die aromatischen Reste der Benzoatanionen aufgefüllt (Abb. 101).

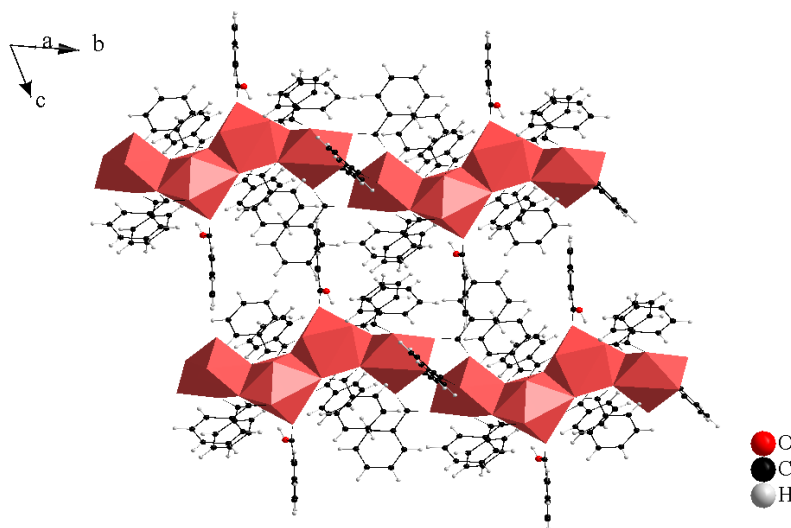


Abb. 101 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten in $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0.5}$.

Die Verbindung $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0.5}$ enthält zwei röntgenographisch unterschiedliche Europiumlagen. In einem Wellenabschnitt sind je zwei Eu1 und Eu2 enthalten, so dass auf zwei Eu1 Lagen zwei Eu2 abwechselnd folgen. Eu1 ist achtfach und Eu2 ist neunfach koordiniert, wobei an jedem Eu2 ein Benzoesäuremolekül lokalisiert ist. Zwei Eu1-Atome sind über vier $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt. Zwischen Eu1 und Eu2 sind es ein $2\Delta, \mu_2$ -, ein $3\Delta, \mu_1$ - und ein $4\Delta, \mu_2$ -Benzoatanion, wobei beide $3\Delta, \mu_1$ - und $4\Delta, \mu_2$ -Benzoateinheiten chelatisierend an das Eu2 koordinieren und dieses im Fall der $4\Delta, \mu_2$ -Benzoateinheit zum nächsten Eu2 verknüpft. Zwei Eu2 Atome sind zusätzlich noch über ein $4\Delta, \mu_2$ - und $2\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen verbrückt, in dem noch die $4\Delta, \mu_2$ -Einheit chelatisierend an das zweite Eu2 koordiniert und dieses zum nächsten Eu1 verknüpft (Abb. 102). Die Benzoesäuremoleküle gehen mit der $2\Delta, \mu_2$ -Benzoateinheit zwischen Eu1 und Eu2 Wasserstoffbrücken ein.

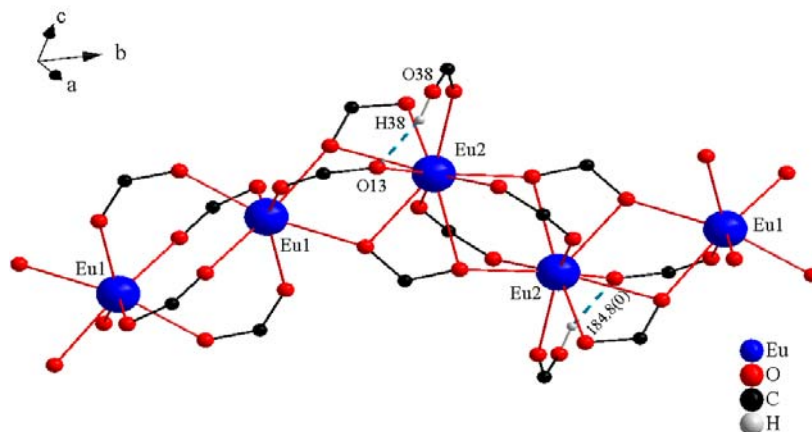


Abb. 102 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Eu^{3+} in $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0.5}$.

Die Ketten sind identisch zueinander in einer hexagonalen Aufstellung entlang [010] angeordnet (Abb. 103).

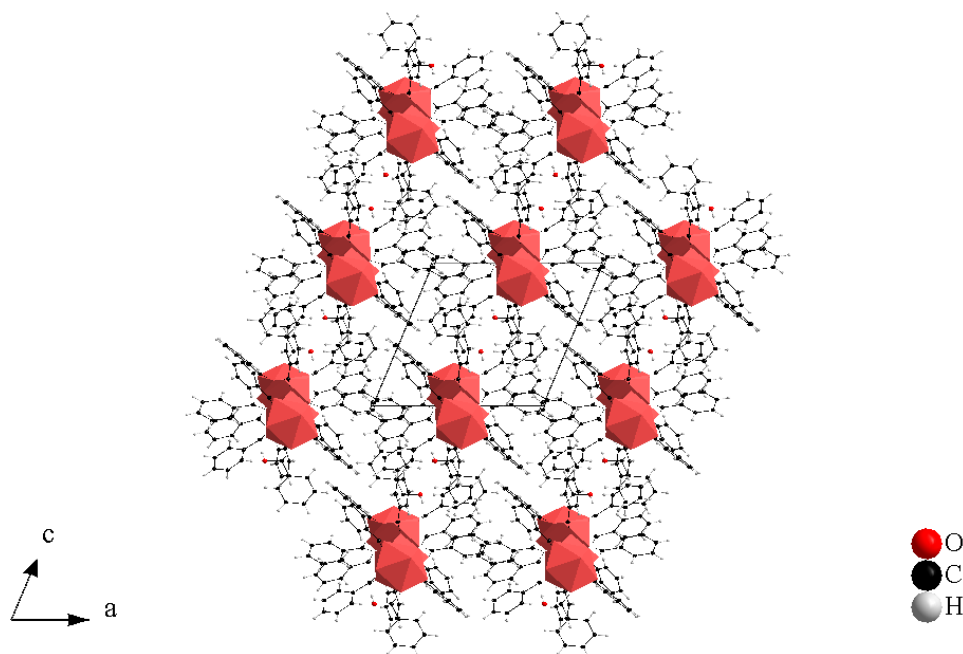


Abb. 103 : Polyedrische Darstellung der Elementarzelle entlang [010] in $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0.5}$.

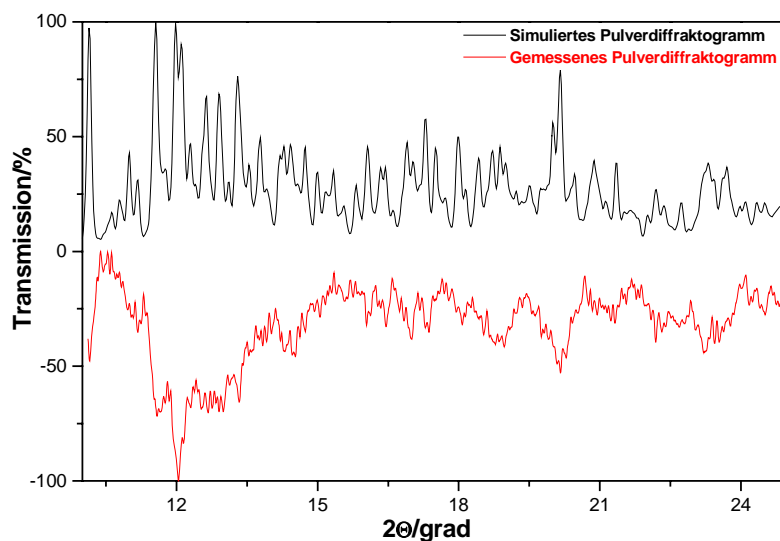
In $\text{Eu}(\text{OBz})_{2.5}(\text{HOBz})$ liegen die Eu–O–Abstände im Bereich zwischen 244,1(7) und 266,7(7) pm mit einem Mittelwert von 251,9 pm. Die Eu–Eu–Abstände liegen im Bereich zwischen 368,0(3) und 368,8(4) pm mit einem Mittelwert von 368,4 pm. In $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0.5}$ liegen die Eu–O–Abstände im Bereich zwischen 231,5(3) und 294,8(3) pm mit einem Mittelwert von 244,8 pm. Die Eu–Eu–Abstände liegen im Bereich zwischen 394,8(9) und 404,0(7) pm mit einem Mittelwert von 399,5 pm. Die wichtigsten Atomabstände sowie ihre Mittelwerte sind in Tabelle 42 zusammengefasst.

Tabelle 42. Ausgewählte Atomabstände [pm] und ihre Mittelwerte von Eu(OBz)_{2,5}(HOBz) (1) und Eu(OBz)₃(HOBz)_{0,5} (2).

(1)			(2)		
Eu1	O3	246,9(8)	Eu1	O11	231,5(3)
Eu1	O13	247,6(9)	Eu1	O8	232,3(3)
Eu1	O9	248,3(7)	Eu1	O12	232,6(3)
Eu1	O11	250,2(8)	Eu1	O7	237,1(3)
Eu1	O8	256,8(8)	Eu1	O6	238,0(3)
Eu1	O12	258,1(8)	Eu1	O4	238,9(3)
Eu1	O5	265,9(7)	Eu1	O3	247,0(3)
Eu1	O4	266,7(7)	Eu1	O11	294,8(3)
<Eu1	O>	255,1	<Eu1	O>	244,0
Eu2	O16	244,1(7)	Eu2	O5	234,9(3)
Eu2	O11	244,4(7)	Eu2	O21	235,5(3)
Eu2	O9	244,9(7)	Eu2	O13	240,8(3)
Eu2	O10	245,2(8)	Eu2	O10	241,0(3)
Eu2	O5	245,3(8)	Eu2	O14	245,3(4)
Eu2	O8	247,1(7)	Eu2	O9	247,0(4)
Eu2	O4	248,2(7)	Eu2	O3	249,5(3)
Eu2	O12	251,2(7)	Eu2	O4	252,7(3)
Eu2	O6	256,7(7)	Eu2	O10	263,0(4)
Eu2	O7	259,5(8)			
<Eu2	O>	248,6	<Eu2	O>	245,5
<Eu1	Eu2>	368,4	<Eu1	Eu2>	399,5
O14H14	O6	185,2(1)	O38H38	O13	184,8(1)
O30H30	O7	193,7(1)			

4.6.4.2 Pulverdiffraktogramme

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Mo-Strahlung ($\lambda = 0,7093 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 104 gegenübergestellt. Es war keine Aussage zur Phasenreinheit möglich, da sowohl das simulierte Mo- oben als auch das simulierte Cu-Pulverdiffraktogramm unten dicht beieinander liegende Signale aufweist. Da beide gemessenen Pulverdiffraktogramme, wobei nur das Mo-Diffraktogramm oben dargestellt ist, keine ausreichende Auflösung der Signale aufweisen, konnte keine genaue Aussage getroffen werden. Es lässt sich jedoch eine gewisse Ähnlichkeit zwischen dem simulierten und dem gemessenen Pulverdiffraktogramm feststellen.



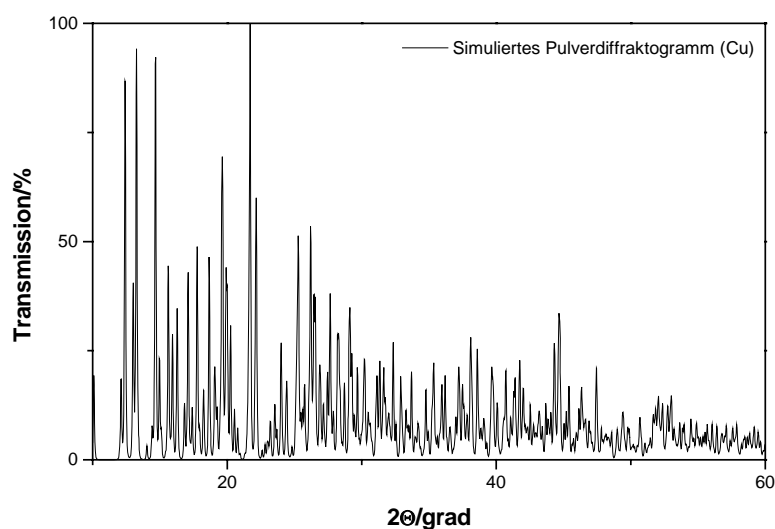


Abb. 104 : Pulverdiffraktogramme von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ auf einem Mo(oben)- und einem Cu(unten)-Diffraktometer.

Das Pulverdiffraktogramm von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ wurde zur Überprüfung der Phasenreinheit mit einem 2θ -Pulverdiffraktometer mit Cu-Strahlung ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$) aufgenommen. Um einen Vergleich ziehen zu können, wurde das gemessene dem simulierten Diffraktogramm aus den Kristalldaten in Abb. 105 gegenübergestellt. Das erhaltene Produkt sieht phasenrein aus.

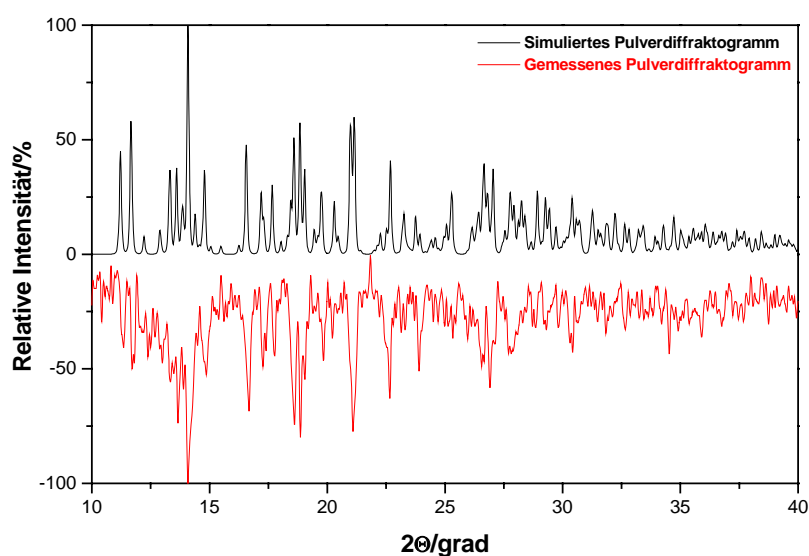


Abb. 105 : Pulverdiffraktogramm von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$.

4.6.5 IR- und Ramanspektren^[46]

Mittels der Infrarot- und der Ramanspektroskopie sollte die organische Umgebung am Metallkation näher untersucht werden. Da es sich bei den Verbindungen dieses Kapitels um Benzoat-Benzoesäure-Addukte handelt mit zwei bzw. einem koordinierenden Benzoesäuremolekül, werden repräsentativ die IR- und Ramanspektren von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ und von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ diskutiert (Abb. 106).

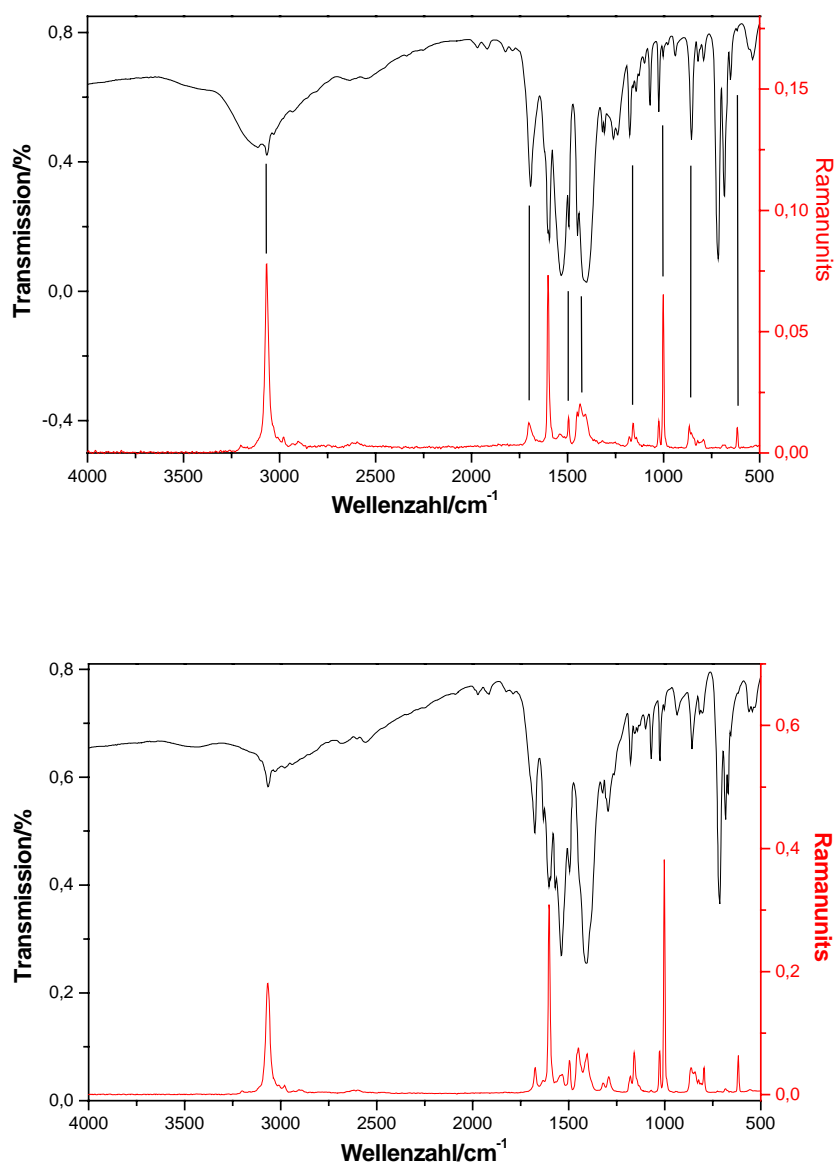


Abb. 106 : IR- und Ramanspektren von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ (oben) und $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$ (unten).

Die beobachteten Banden im IR- und Ramanspektrum konnten den Valenz- und Deformationsschwingungen, die für das Benzoat-Benzoesäure-Addukt zu erwarten sind, zugeordnet werden (Tabelle 43, 44). Aufgrund des hohen Untergrunds im Ramanspektrum sind nur die intensivsten Banden berücksichtigt worden. Es ist festzustellen, dass das Spektrum der Europiumverbindung mit nur einem koordinierenden Benzoessäuremolekül und somit weniger Wasserstoffbrückenbindungen, wie erwartet, eine weniger intensive Bande für die $\nu(\text{OH})$ – Valenzschwingung enthält.

Tabelle 43. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3623 – 3091	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	3064 – 3029	~3066
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	~2931	–
$\nu_{\text{Ober, Kombi}}$	2631 – 2538	–
	1974 – 1785	–
$\nu(\text{C=O})$	~1693	~1699
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	1594 – 1492	1600 – 1494
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	1448 – 1402	1448 – 1404
$\nu(\text{C-O})$	1309 – 1238	–
$\delta(\text{C-CH})$	1176 – 1070	~1157
$\delta(\text{O-OH})$	1024 – 939	1024 – 1001
$\delta(\text{C-C})$	825 – 790	866 – 790
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	717 – 536	~615

Tabelle 44. Spektroskopische Daten zum IR- und Ramanspektrum von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$.

Valenz(ν)- und Deformations(δ)- schwingungen	Infrarotbande in Wellenzahl [cm^{-1}]	Ramanbande in Wellenzahl [cm^{-1}]
$\nu(\text{OH})$	3623 – 3315	–
$\nu(\text{CH})_{\text{as}}$	3064 – 3023	~3066
$\nu(\text{CH})_{\text{s}}$	2975 – 2933	~2977
$\nu_{\text{Ober, Kombi}}$	2680 – 2559	–
	1970 – 1787	–
$\nu(\text{C}=\text{O})$	~1677	~1673
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	1600 – 1494	1602 – 1494
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	~1413	1450 – 1403
$\nu(\text{C}-\text{O})$	~1297	1301 – 1290
$\delta(\text{C}-\text{CH})$	1176 – 1002	1178 – 1159
		1025 – 1002
$\delta(\text{O}-\text{OH})$	~933	–
$\delta(\text{C}-\text{C})$	854 – 809	863 – 794
$\delta(\text{COO}^-), \tau(\text{COO}^-)$	713 – 541	678, 617

5 Spezielle Untersuchungen an ausgewählten Verbindungen

5.1 Magnetismus

Zur genaueren Betrachtung der elektronischen Umgebung am jeweiligen Metallkation wurde das magnetische Verhalten an ausgewählten Verbindungen in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Zu den ausgewählten Verbindungen zählen die Benzoatsolvate von Eisen $\text{Fe}(\text{OBz})_2$, Mangan $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ und Europium $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$. Sie enthalten von allen im Rahmen dieser Arbeit hergestellten Verbindungen die kürzesten Metall–Metall–Abstände mit $d(\text{Fe-Fe}) = 325,8(1) \text{ pm}$; $\langle d(\text{Mn-Mn}) \rangle = 342,4 \text{ pm}$; $\langle d(\text{Eu-Eu}) \rangle = 368,4 \text{ pm}$, so dass magnetische Wechselwirkungen über die diamagnetischen, verbrückenden Carboxylateinheiten am ehesten zu erwarten sind. In den restlichen Verbindungen liegen die Metall–Metall–Abstände zwischen 388 und 488 pm, mit der Ausnahme des Eisenpropionats mit $\langle d(\text{Fe-Fe}) \rangle = 323,2 \text{ pm}$, das jedoch nur in seiner Mutterlauge beständig und somit für magnetische Messung ungeeignet ist.

5.1.1 Eisenbenzoat, $\text{Fe}(\text{OBz})_2$

Die temperaturabhängige Messung der magnetischen Suszeptibilität χ von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ wurde zwischen 4,2 und 200 K bei einem äußeren magnetischen Feld von 5 T mit einem Quantum Design MPMS2 SQUID–Magnetometer durchgeführt. Die experimentellen Daten wurden um den diamagnetischen Anteil unter Verwendung von Pascal–Konstanten korrigiert [47].

Die reziproke Suszeptibilität χ^{-1} als Funktion der Temperatur zeigt oberhalb von 50 K ein Curie–Weiss–Verhalten mit einer paramagnetischen Curie–Temperatur von $\Theta_p = -32 \text{ K}$, die durch antiferromagnetische Wechselwirkung verursacht wird (Abb. 107).

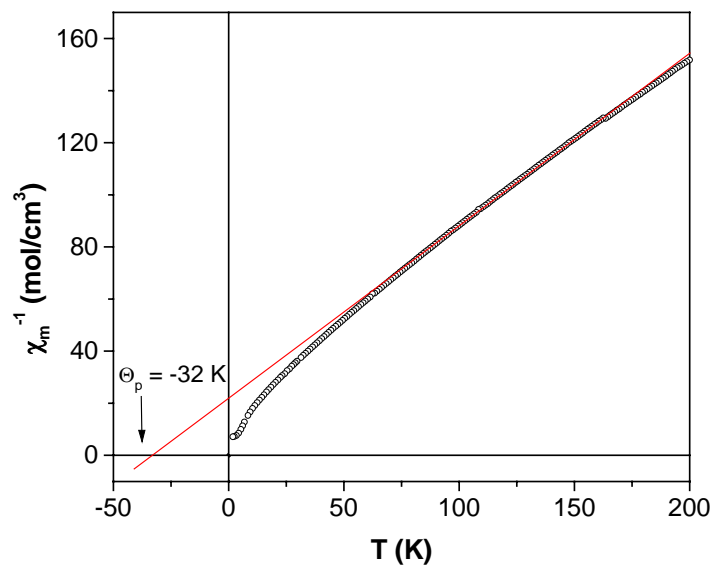


Abb. 107 : Die reziproke magnetische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Das gemessene, effektive magnetische Moment μ_{eff} von $3,2 \mu_{\text{B}}$ bei 200 K ist erheblich kleiner als das berechnete Moment von $6,71 \mu_{\text{B}}$, wie durch die spin-only-Formel $\mu_{\text{eff}}(\text{theo.}) = g[S \cdot (S + 1)]$ berechnet wird (Abb. 108). Diese Differenz wird durch die antiferromagnetischen Wechselwirkungen verursacht.

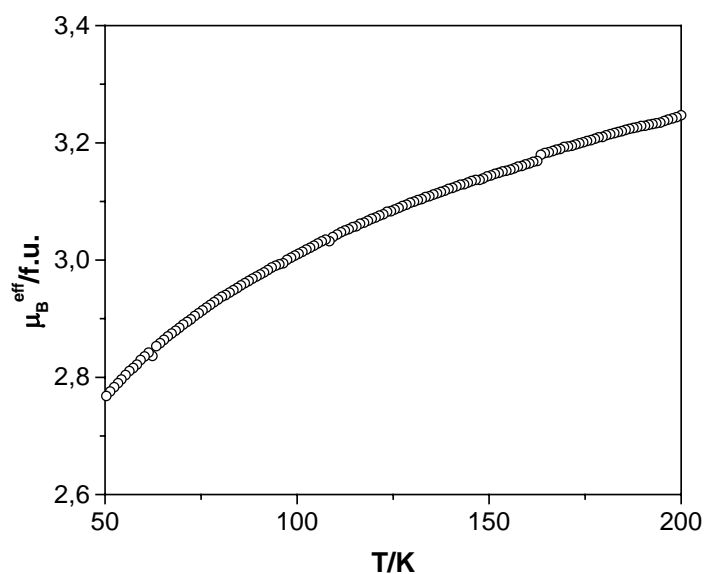


Abb. 108 : Das effektive magnetische Moment als Funktion der Temperatur von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Der Graph zu $\chi_m \cdot T$ nimmt unterhalb 50 K stark ab, was auf das Vorliegen von zero-field-splitting hindeutet (Abb. 109). Das Auftreten von zero field splitting ist typisch für zweiwertiges Eisen und kann erklärt werden als eine bevorzugte Besetzung der niederen Niveaus des im äußeren Feld aufgespalteten magnetischen Zustands bei tiefen Temperaturen.

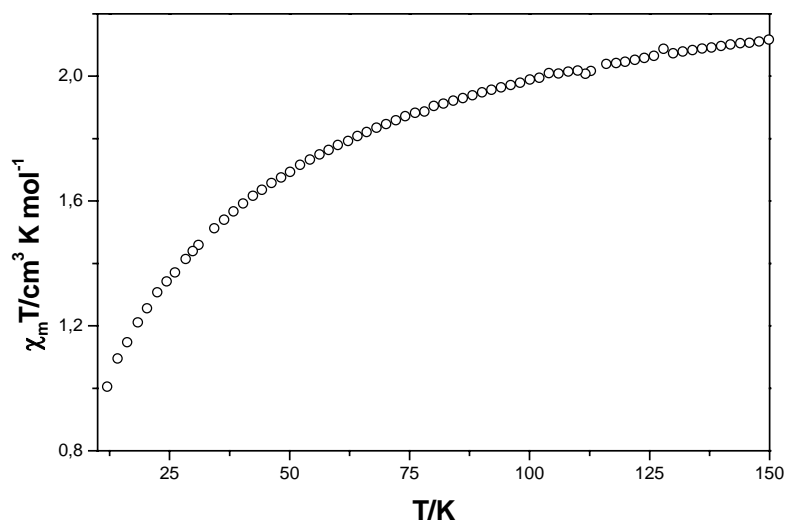


Abb. 109 : $\chi_m \cdot T$ als Funktion der Temperatur von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

5.1.2 Manganbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$

Die temperaturabhängige Messung der magnetischen Suszeptibilität χ von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ wurde zwischen 4,2 und 300 K bei einem äußeren magnetischen Feld von 5 T mit einem Quantum Design MPMS2 SQUID-Magnetometer durchgeführt. Die experimentellen Daten wurden um den diamagnetischen Anteil unter Verwendung von Pascal-Konstanten korrigiert [47].

Die reziproke Suszeptibilität χ^{-1} als Funktion der Temperatur zeigt oberhalb von 50 K ein Curie-Weiss-Verhalten mit einer paramagnetischen Curie-Temperatur von $\Theta_p = -30$ K, das durch antiferromagnetische Wechselwirkungen verursacht wird (Abb. 110).

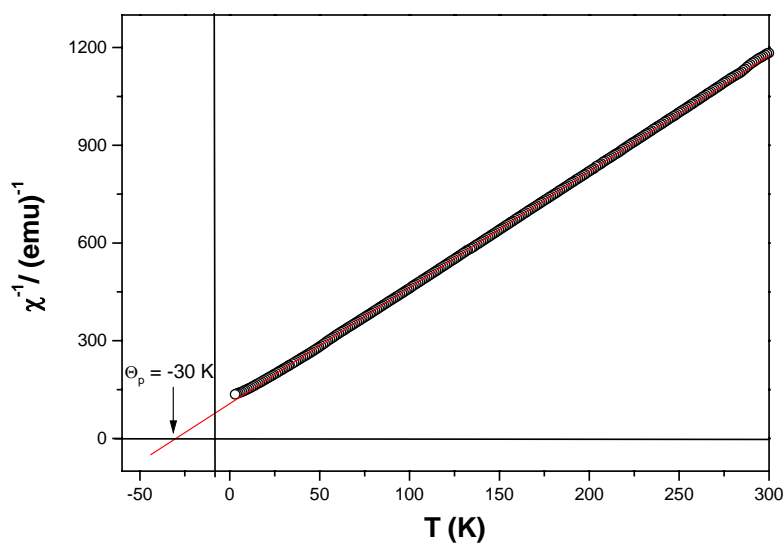


Abb. 110 : Die reziproke magnetische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur von $\text{Mn(OBz)}_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Das gemessene effektive magnetische Moment μ_{eff} von $5,4 \mu_{\text{B}}$ bei 200 K ist kleiner als das berechnete Moment von $5,92 \mu_{\text{B}}$, wie es mit der spin-only Formel $\mu_{\text{eff}}(\text{theo.}) = g[S \cdot (S + 1)]$ berechnet wird (Abb. 111). Diese Differenz wird durch die antiferromagnetischen Wechselwirkungen verursacht.

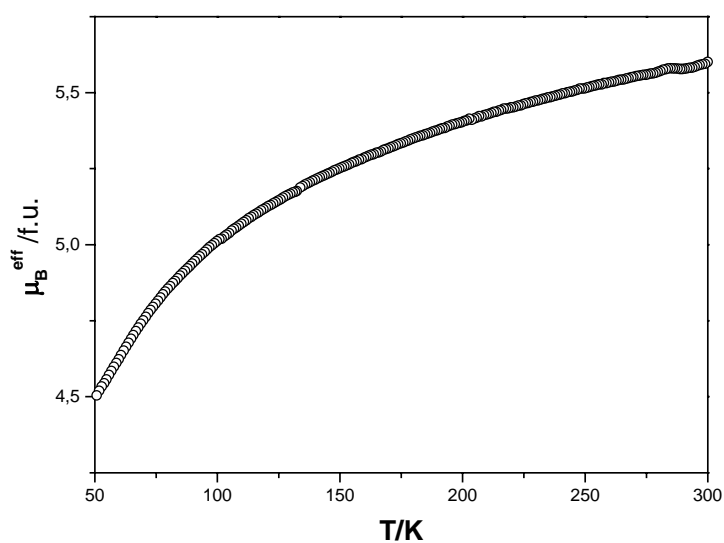


Abb. 111 : Das effektive magnetische Moment als Funktion der Temperatur von $\text{Mn(OBz)}_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Der Graph zu $\chi_m \cdot T$ nimmt unterhalb 50 K stark ab, was auf das Vorliegen von zero-field-splitting hindeutet (Abb. 112). Das Auftreten von zero-field-splitting ist typisch für zweiwertiges Mangan und kann erklärt werden als eine bevorzugte Besetzung der niederen Niveaus des im äußeren Feld aufgespalteten magnetischen Zustands bei tieferen Temperaturen.

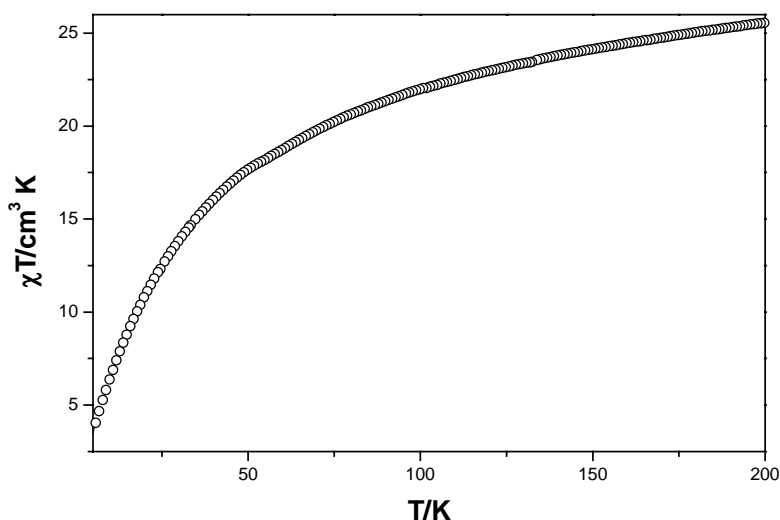


Abb. 112 : $\chi_m \cdot T$ als Funktion der Temperatur von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

5.1.3 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$

Die temperaturabhängige Messung der magnetischen Suszeptibilität χ der Verbindung $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurde zwischen 4,2 und 300 K bei einem äußeren magnetischen Feld von 5 T mit einem Quantum Design MPMS2 SQUID-Magnetometer durchgeführt. Die experimentellen Daten wurden um den diamagnetischen Anteil unter Verwendung von Pascal-Konstanten korrigiert [47].

Die reziproke Suszeptibilität χ^{-1} als Funktion der Temperatur zeigt über den ganzen Temperaturbereich ein nahezu lineares Verhalten mit einem Schnittpunkt bei 0 K, wie für eine paramagnetische Probe zu erwarten ist. Der Graph zeigt jedoch eine ungewöhnliche,

geringe Krümmung mit einem Maximum bei ca. 175 K. Wenn nur der höhere Temperaturbereich um 175 K betrachtet wird, erhält man eine paramagnetische Curie-Temperatur von $\Theta_p = -6,5$ K. (Abb. 113). Es könnte sich dabei um leichte antiferromagnetische Wechselwirkungen handeln, die zu niederen Temperaturen abnimmt, weil dann die statistische Verteilung von Eu^{2+} und Eu^{3+} abnimmt und die sterischen Spannungen der verbrückenden Benzoatanionen zunehmen.

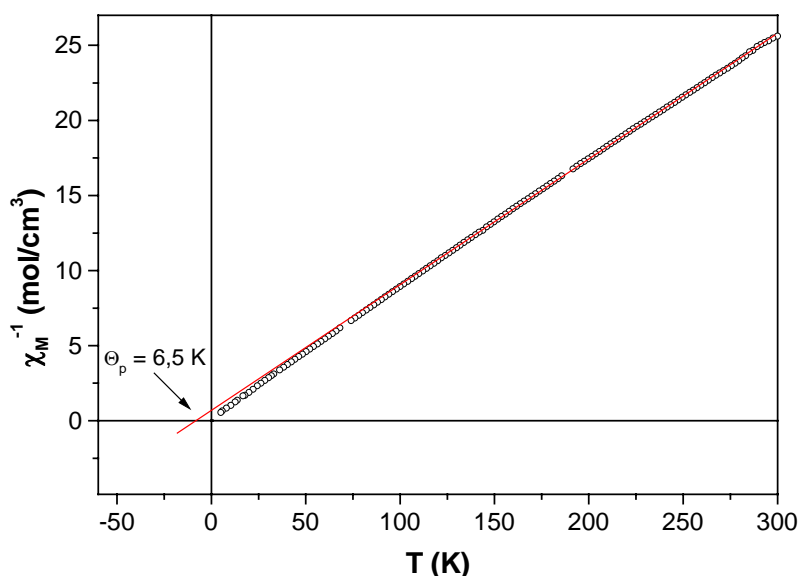


Abb. 113 : Die reziproke magnetische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur von $\text{Eu(OBz)}_{2,5}(\text{HOBz})$.

Das gemessene effektive magnetische Moment μ_{eff} von $6,75 \mu_B$ bei 200 K ist kleiner als das berechnete Moment von $7,94 \mu_B$ für Eu^{2+} , das sich aus der Formel $\mu_{\text{eff}}(\text{theo.}) = g_J [J \cdot (J + 1)]^{1/2}$ ergibt (Abb. 114). Diese Differenz wird meist durch antiferromagnetische Wechselwirkung verursacht und unterstützt die Annahme solcher Wechselwirkung in dieser Verbindung.

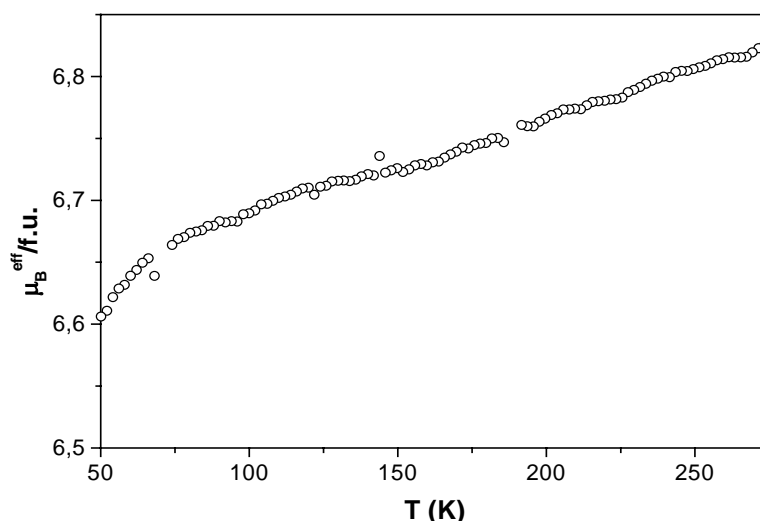


Abb. 114 : Das effektive magnetische Moment als Funktion der Temperatur von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

5.2 Mößbauerspektroskopie

Mittels der Mößbauerspektroskopie sollten elektronische Unterschiede am Metallkation in Verbindungen mit verschiedenen Metalllagen näher untersucht werden. Zum einen wurde das Mößbauerspektrum von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ gemessen, da hier ein für Fe^{2+} ungewöhnlicher Polyeder enthalten ist. Zum anderen wurde das Mößbauerspektrum von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ gemessen, um den angenommenen, gemischtvalenten Zustand von Europium in dieser Verbindung zu überprüfen.

5.2.1 Eisenbenzoat, $\text{Fe}(\text{OBz})_2$

Das ^{57}Fe -Spektrum von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ wurde bei 4,2 K mit einem Mößbauer-Spektrometer aufgenommen, das mit einer konstanten Beschleunigung, einer 50 mCi $^{57}\text{Co}/\text{Rh}$ -Quelle und einem mit flüssigem Helium gefüllten Kryostaten ausgestattet ist.

Das Mößbauerspektrum weist zwei Doublets mit unterschiedlicher Isomerieverschiebung (IS) und Quadrupolaufspaltung (ΔE_Q) auf, die verschiedenen Fe^{2+} -Ionen in der Verbindung im Verhältnis 1:1 zuzuordnen sind (Abb. 115).

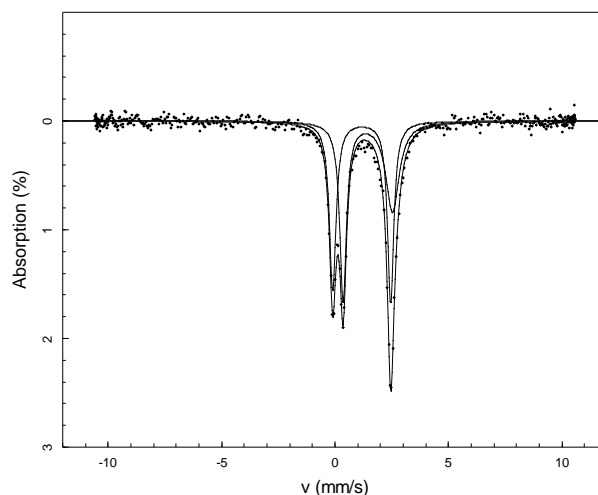


Abb. 115 : Das Mößbauerspektrum von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ bei 4,2 K.

Dublett 1 mit $\text{IS}(1) = 1,18(1) \text{ mms}^{-1}$ und $\Delta E_Q(1) = 2,56(2) \text{ mms}^{-1}$ entspricht einer Eisenlage im high-spin-Zustand mit einer geringen elektronischen Dichte und in einer stark verzerrten Umgebung. Doublet 2 mit $\text{IS}(2) = 1,44(2) \text{ mms}^{-1}$ und $\Delta E_Q(2) = 2,18(3) \text{ mms}^{-1}$ entspricht einer Eisenlage im high-spin Zustand mit einer hohen elektronischen Dichte in einer gering verzerrten Umgebung. Bezogen auf die Röntgenstrukturanalyse dieser Verbindung kann Dublett 1 der Eisenlage Fe2 in einer ideal-oktaedrischen Umgebung und Dublett 2 der Eisenlage Fe1 in dem ungewöhnlichen Polyeder zugeordnet werden.

Das Spektrum enthält keine magnetische Aufspaltung. Dies lässt sich mit der Untersuchung des magnetischen Verhaltens vereinbaren, in der antiferromagnetische Wechselwirkungen aber keine magnetische Ordnung nachgewiesen werden konnte.

5.2.2 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$

Das ^{151}Eu -Spektrum von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurde im Bereich zwischen 290 und 80 K mit einem Mößbauer-Spektrometer aufgenommen, das mit einer konstanten Beschleunigung, einer 200 mCi $^{151}\text{Sm}_2\text{O}_3$ -Quelle und einem mit gasförmigem Stickstoff gefüllten Kryostaten ausgestattet ist.

Das Mößbauerspektrum zeigt zwei Zustände des Europiums mit unterschiedlicher Isomerieverschiebung hin, eine bei nahezu 0 mms^{-1} für Eu^{3+} und eine bei -14 mms^{-1} für Eu^{2+} (Abb. 116).

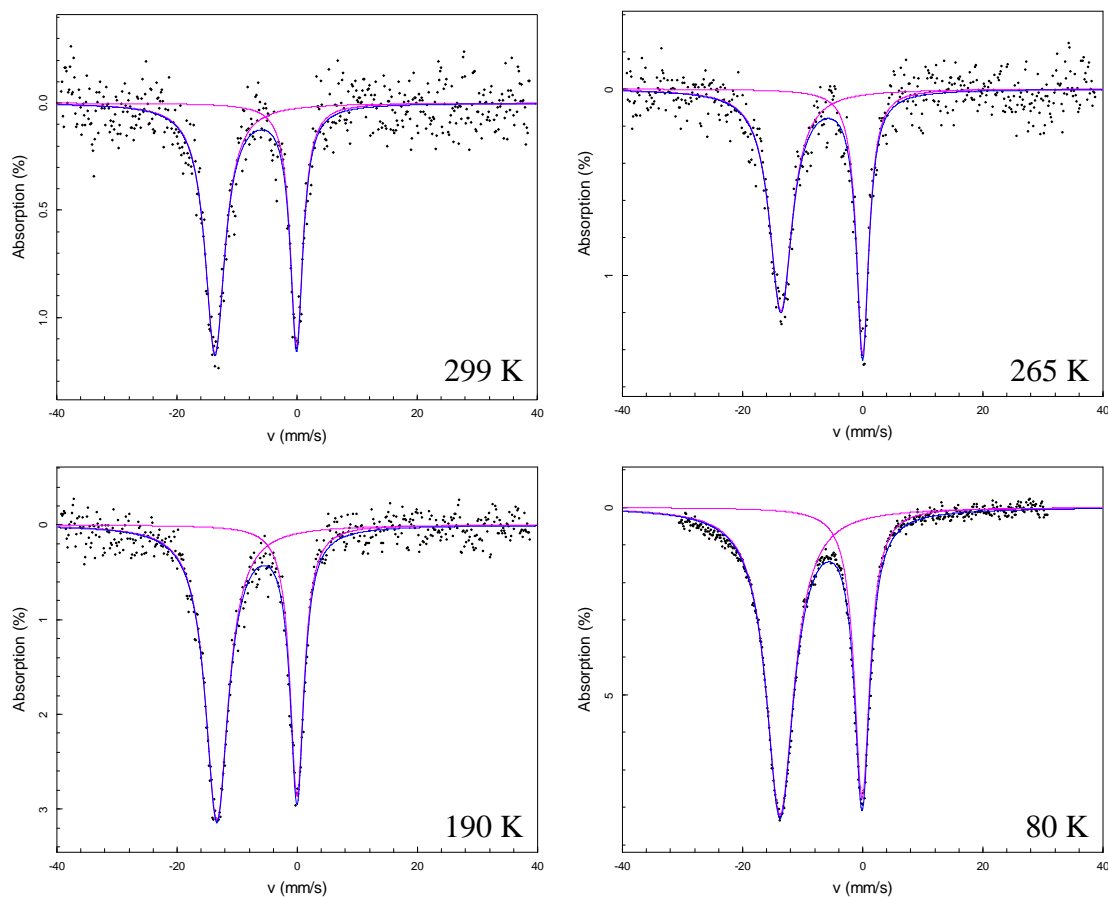


Abb. 116 : Mößbauerspektren von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ zwischen 299 und 80 K.

Alle Spektren enthalten ein Verhältnis dieser beiden Zustände von 2:1 für $\text{Eu}^{2+}/\text{Eu}^{3+}$, was dem erwarteten Verhältnis aus der Röntgenstrukturanalyse von 1:1 widerspricht. Dies könnte bei einer statistischen Verteilung der Europiumlagen Eu1 und Eu2 mit Eu^{2+} und Eu^{3+} auftreten. Leider kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Probe verunreinigt war, da das Pulverdiffraktogramm nicht ausgewertet werden kann.

5.3 Lumineszenzspektroskopie

Eine der wichtigsten Eigenschaften von Festkörpern wie z.B. der Carboxylate der Seltenerdmetalle ist ihr Potential, mit Kationen der Elektronenkonfiguration $[\text{Xe}]4f^n$ Energie zu speichern und in manchen Fällen sogar erst unter Stimulation, wie z.B. durch Wärme wieder zu emittieren. Diesen Vorgang bezeichnet man als Lumineszenz. Die $4f^n-4f^n$ -Übergänge sind im Gegensatz zu den $4f^n-4f^{n-1}5d^1$ -Übergängen von der Umgebung am Metallzentrum fast unabhängig und somit für das jeweilige Metallkation spezifisch. Sie sind jedoch paritätsverboten und erzeugen daher nur schmale Banden, im Gegensatz zu den paritätserlaubten und somit intensiven $4f^n-4f^{n-1}5d^1$ -Übergängen mit breiter Bande, die außerdem von der chemischen Umgebung stark abhängig sind.

Diese optische Eigenschaft ist an den Europiumverbindungen $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ untersucht worden. Bei dem gemischtvalenten Europiumbenzoat-Benzoessäure-Addukt sollte zusätzlich zwischen den beiden Zuständen des Europiumatoms unterschieden werden, da die Übergänge des zweiwertigen Europiumatoms zu kleineren Wellenlängen verschoben sind.

In Abb. 117 ist ein Energieniveaudiagramm zu den möglichen elektronischen Übergängen dargestellt, die für das Eu^{3+} zu erwarten sind. In Abb. 118 ist außerdem eine Übersicht zu allen Übergängen gegeben, in denen die Eigenschaften und die zugehörigen Wellenlängenbereiche im Einzelnen hervorgehoben werden.

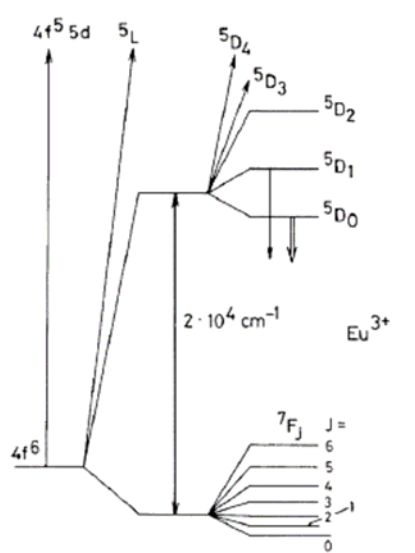


Abb. 117 : Energieniveaudiagramm der elektronischen Übergänge von Eu^{3+} [48].

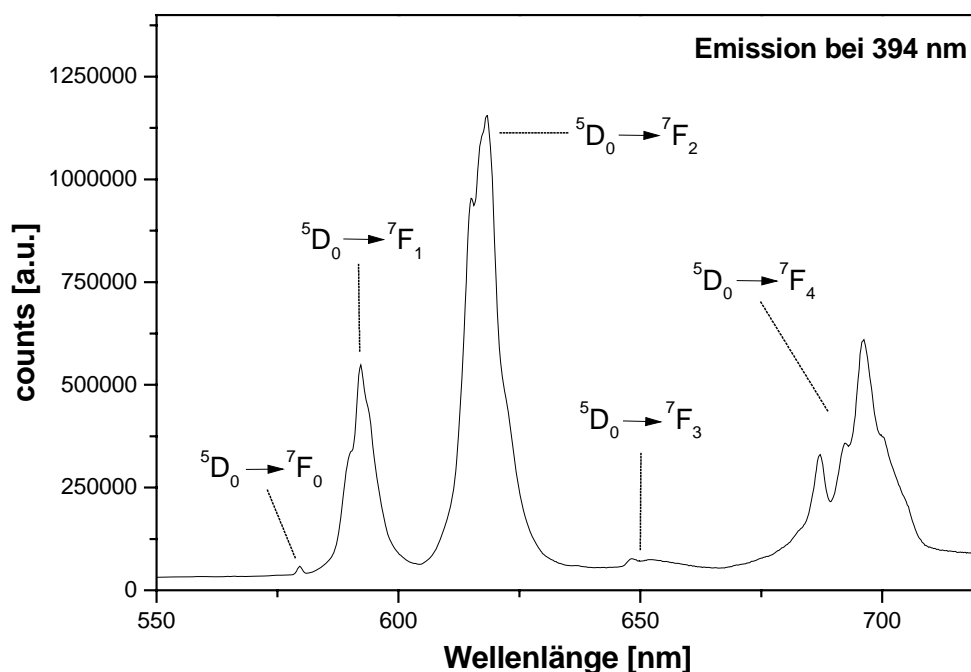
J	Dipolübergänge	Wellenlängenbereich (nm)	Intensität	Eigenschaften
$^5D_0 \rightarrow ^7F_J$				
0	ED	577-581	vw	entarteter verbotener Übergang; Zunahme der Intensität durch Beimischen von Konfigurationen; bei hoher Punktsymmetrie verboten
1	MD	585-600	s	Erlaubter Übergang; Intensität unabhängig von chemischen Umgebung
2	ED	610-625	s-vs	hypersensitiver Übergang ($\Delta J=2$); abwesend bei hoher Punktsymmetrie
3	ED	640-655	vw	verboten; immer schwach; J-Beimischen erlaubt ein MD Charakter
4	ED	680-710	m-s	empfindlich gegenüber der chemischen Umgebung
5	ED	740-770	v-w	verboten, selten beobachtet
6	ED	810-840	vw	selten gemessen
$^5D_1 \rightarrow ^7F_J$				
0	MD	524-528	vw	sensibel gegenüber der chemischen Umgebung
1	ED	530-540	vw	
2	ED	550-565	vw	

Abb. 118 : Übersicht der elektronischen Übergänge von Eu^{3+} [48].

5.3.1 Europiumacetathydrat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$

$\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ wurde auf ihre Fähigkeit zu lumineszieren untersucht, indem eine Probenmenge in eine 0,6 mm–Kieselglaskapillare eingeschmolzen und mit UV-Licht bestrahlt wurde. Die Messung ist mit einem Lumineszenzspektrometer FluoroMax-3 durchgeführt worden.

Das Emissions- und das Anregungsspektrum von Eu^{3+} für $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ enthält Banden, die den $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_J$ -Übergängen mit $J = 0, 1, 2, 3, 4$ entsprechen (Abb. 119). Das Emissionsspektrum wurde nach einer Anregung bei 394 nm aufgenommen, das Anregungsspektrum bei einer Wellenlänge von 618 nm, die der intensivsten Bande im Emissionsspektrum zuzuordnen ist. Die zugehörigen Wellenlängen sind der Tabelle 45 im Detail zu entnehmen.



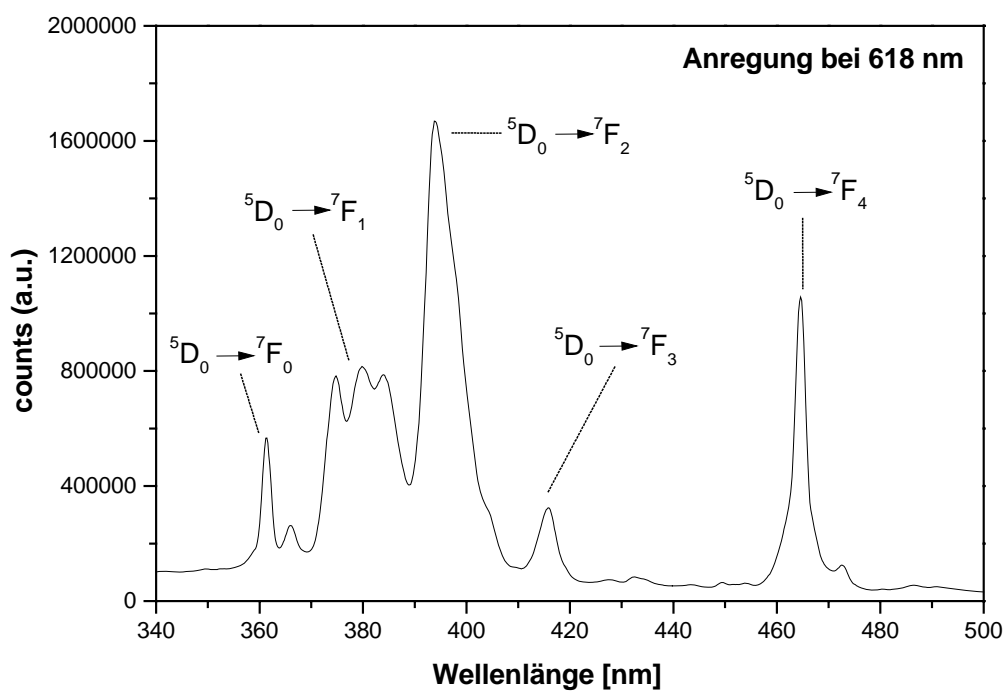


Abb. 119 : Emissions- (oben) und Anregungsspektrum (unten) von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1.5}$.

Tabelle 45. Übergänge und zugehörige Wellenlängen von Eu^{3+} in $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1.5}$.

Elektronischer Übergang	Wellenlänge [nm]	Wellenlänge [nm]
	Emission	Anregung
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$	579	361 – 365
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$	590 – 592	374 – 384
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$	615 – 618	393
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_3$	648 – 651	415
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_4$	687 – 700	464 – 472

5.3.2 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$

$\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurde auf ihre Fähigkeit zu lumineszieren untersucht, indem eine Probenmenge in eine 0,6 mm Quarzglaskapillare eingeschmolzen und mit UV-Licht bestrahlt wurde. Die Messung ist mit einem Lumineszenzspektrometer FluoroMax-3 durchgeführt worden.

Das Emissionsspektrum von Eu^{3+} für $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ enthält Banden, die den $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_J$ -Übergängen mit $J = 0, 1, 2, 3, 4$ entsprechen (Abb. 120). Das Emissionsspektrum wurde nach einer Anregung bei 394 nm aufgenommen und weist, verglichen mit dem Emissionsspektrum von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$, breitere Banden auf. Die zugehörigen Wellenlängen sind der Tabelle 46 im Detail zu entnehmen.

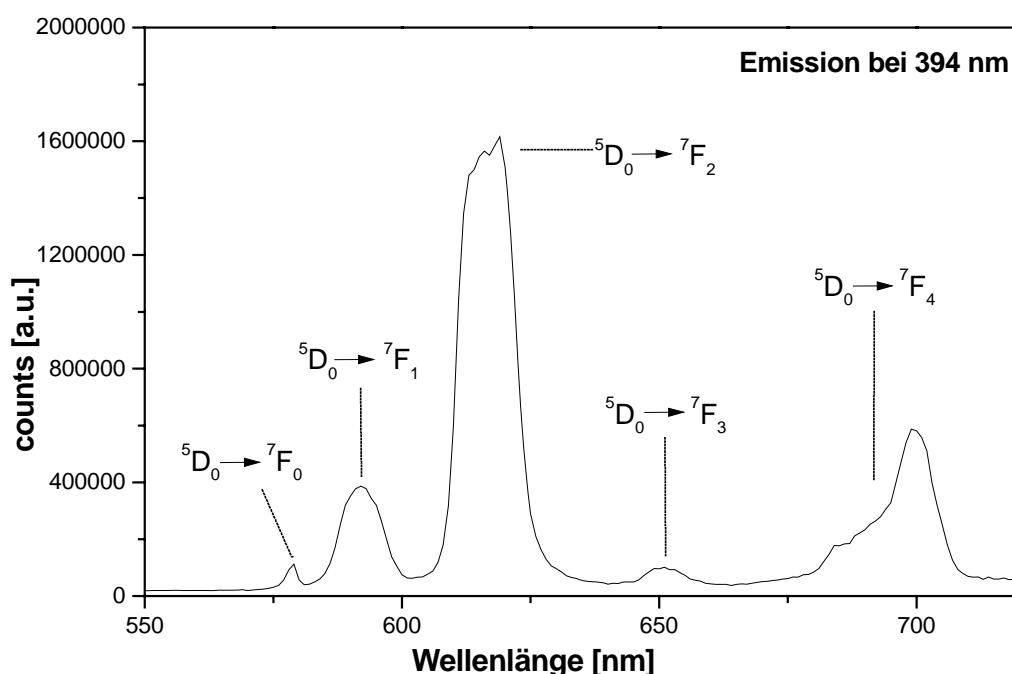


Abb. 120 : Emissionsspektrum von Eu^{3+} in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Tabelle 46. Übergänge und zugehörige Wellenlängen von Eu^{3+} in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Elektronischer Übergang	Wellenlänge [nm]
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$	578
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$	592
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$	616 – 618
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_3$	651
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_4$	684 – 699

Das Emissionsspektrum von Eu^{2+} in der Verbindung $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ ist bei einer Anregung von 250 nm aufgenommen worden. Es ist keine Aussage zu den Übergängen von Eu^{2+} möglich, da sie mit den deutlich breiteren und intensiveren Schwingungsübergängen der umgebenen aromatischen Gruppen überlappen (Abb. 121).

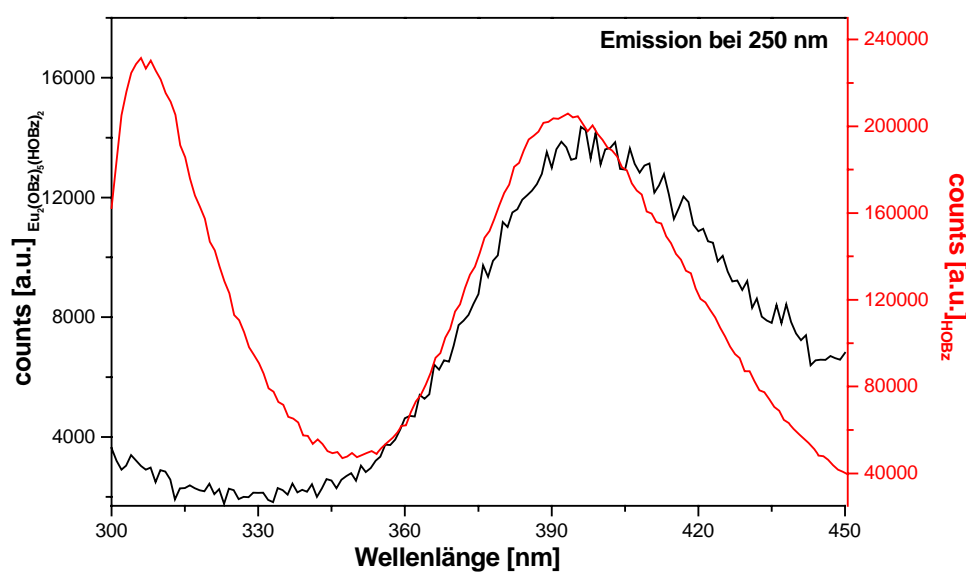


Abb. 121 : Emissionsspektrum von Eu^{2+} in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

5.4 Thermoanalyse

Das thermische Verhalten der Seltenerdmetallbenzoate $\text{Gd}(\text{OBz})_3$, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurde mittels Differenz-Scanning-Kalorimetrie untersucht. Dazu wird eine bestimmte Probenmenge in einem Aluminiumtiegel mit passendem Aluminiumdeckel unter Druck verschlossen und gegen einen leeren, verschlossenen Aluminiumtiegel als Referenz gemessen. Da es sich um ein geschlossenes System handelt, kann durch cyclisches Fahren des Temperaturprogrammes überprüft werden, ob bestimmte Übergänge Reversibilität aufweisen.

5.4.1 Thermischer Abbau von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$

Zur Untersuchung des thermischen Verhaltens von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$ wurden 7 mg der Verbindung in einem Aluminiumtiegel verschlossen und mehrmals in einem Temperaturbereich von 0 – 220°C mit 10 °C/min aufgeheizt und abgekühlt.

Die Aufheizkurve zeigt einen endothermen Übergang bei ca. 121°C mit einer Enthalpie von $\Delta H_{\text{m},s} = 55,99 \text{ J/g}$ (Abb. 122). Dieser liegt nahe zum Schmelzpunkt der Benzoesäure. Wie aus dem zugehörigen Pulverdiffraktogramm ersichtlich wird, enthält die Probe überschüssige Benzoesäure. Da ansonsten kein weiterer Übergang erhalten wurde, liegt die Vermutung nahe, dass sich der Schmelzvorgang der eigentlichen Verbindung mit diesem überschneidet. Der zugehörige Übergang in der Abkühlkurve befindet sich, typischerweise etwas zu tieferen Temperaturen verschoben, bei ca. 99°C mit einer Enthalpie von $\Delta H_{\text{m},s} = 54,7 \text{ J/g}$ entsprechend. Die beiden Übergänge sind reversibel.

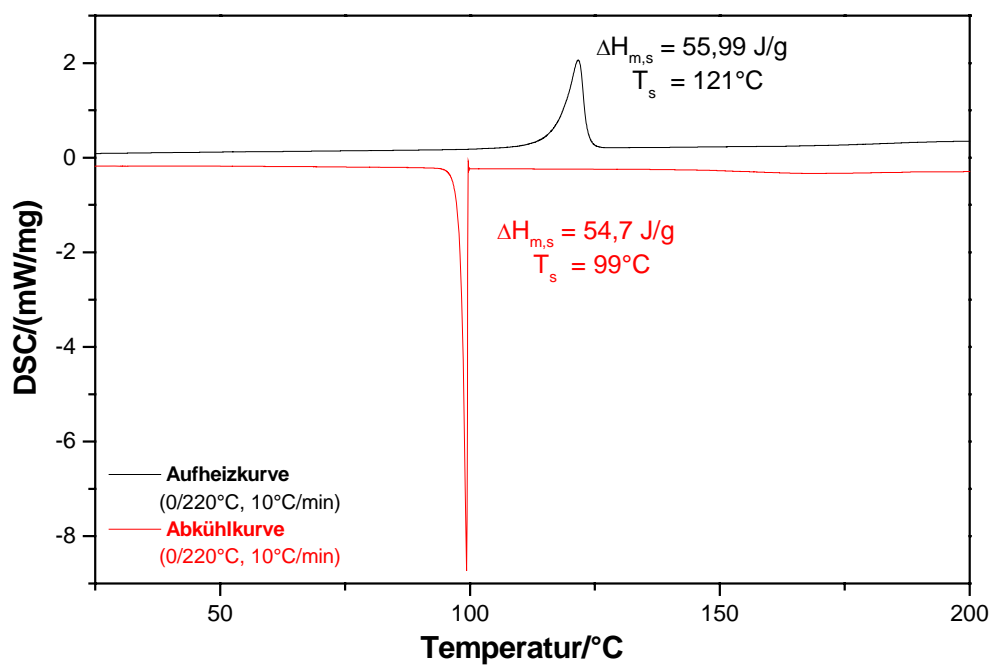


Abb. 122 : DSC-Kurvenverlauf für $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

5.4.2 Thermischer Abbau von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$

Zur Untersuchung des thermischen Verhaltens von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ wurden 7,2 mg der Verbindung in einem Aluminiumtiegel verschlossen und mehrmals in einem Temperaturbereich von 0 – 220°C mit 10°C/min aufgeheizt und abgekühlt.

Die Aufheizkurve zeigt zwei endotherme Übergänge, den ersten bei ca. 120°C mit einer Enthalpie von $\Delta H_{m,s} = 16,3 \text{ J/g}$ und den zweiten den ersten bei ca. 161°C mit einer Enthalpie von $\Delta H_{m,s} = 52,4 \text{ J/g}$ (Abb. 123). Da die Probe keine überschüssige Benzoesäure enthält, wie aus dem Pulverdiffraktogramm ersichtlich ist, ist der erste Übergang dem Verlust der beiden koordinierenden Benzoesäuremolekülen zuzuordnen, während der zweite dem Schmelzvorgang der restlichen Verbindung entspricht. Die zugehörigen Übergänge in der Abkühlkurve befinden sich, bei ca. 112°C mit einer Enthalpie von $\Delta H_{m,s} = -44,3 \text{ J/g}$ und bei ca. 97°C mit einer Enthalpie von $\Delta H_{m,s} = -14,7 \text{ J/g}$ entsprechend. Die beiden Übergänge sind reversibel.

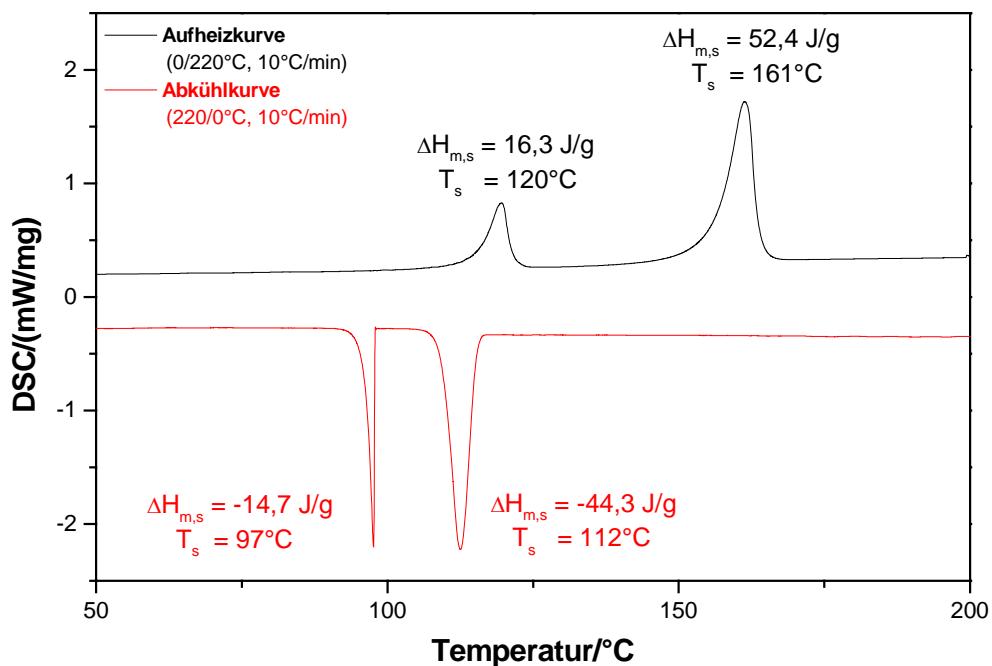


Abb. 123 : DSC-Kurvenverlauf für $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

5.4.3 Thermischer Abbau von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$

Zur Untersuchung des thermischen Verhaltens von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurden 11,7 mg der Verbindung in einem Aluminiumtiegel verschlossen und mehrmals in einem Temperaturbereich von 0 – 200°C mit 10°C /min aufgeheizt und abgekühlt.

Die erste Aufheizkurve zeigt ein inhomogenes Aufschmelzen der Probe mit einem breiten Übergang bei ca. 153°C mit einer Enthalpie von nur $\Delta H_{m,s} = 10,4 \text{ J/g}$ (Abb. 124). Dieser Übergang verändert die Probe irreversibel. Die Abkühlkurve zeigt bei ca. 92°C und $\Delta C_p^* = 0,183 \text{ J/(g}\cdot\text{K)}$ wie auch die zweite Aufheizkurve bei ca. 85°C und $\Delta C_p^* = 0,213 \text{ J/(g}\cdot\text{K)}$ einen Glasübergang an. Anders als beim vorherigen Praseodymbenzoatsolvat entweicht in dieser Verbindung nicht zunächst die Benzoessäure.

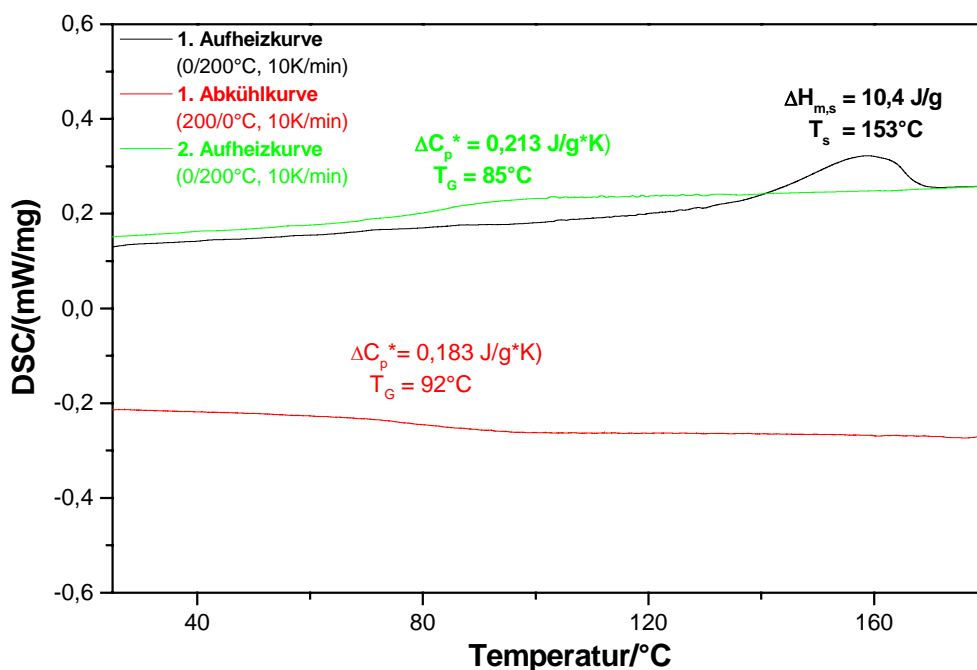


Abb. 124 : DSC-Kurvenverlauf für $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

5.5 Untersuchungen mittels REM und EDX

Aufgrund der zunehmenden Anwendung von lumineszierenden, nanogroßen Leuchtzentren z.B. in PCs, wurde das Zersetzungsprodukt der Verbindung $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ mittels REM und EDX untersucht. Das Europiumacetathydrat $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ wurde aufgrund seiner lumineszierenden Fähigkeiten ausgewählt.

5.5.1 Zersetzungsprodukt aus Nanoteilchen

Das Zersetzungsprodukt von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ wurde hergestellt, indem eine Probe im Argongegenstrom in eine heiße Glasampulle eingebracht und dort schnell zersetzt wurde. Dazu wurde ein Quickfit mit eingeschmolzenem Trichter verwendet, durch den beim Anbringen an einer Vakuumapparatur Argongas durchgeleitet werden kann (Abb. 125). Zunächst wurde das Ende der Kieselglasampulle stark von außen mit einem Knallgasbrenner erhitzt und dann die Probe durch den Trichter gezielt eingeleitet.



Abb. 125 : Spezielles Quickfit mit Trichter.

Das Zersetzungsprodukt besteht aus porösen Plättchen, die nach EDX–Aufnahmen nur Europium und Sauerstoff enthalten (Abb. 126).

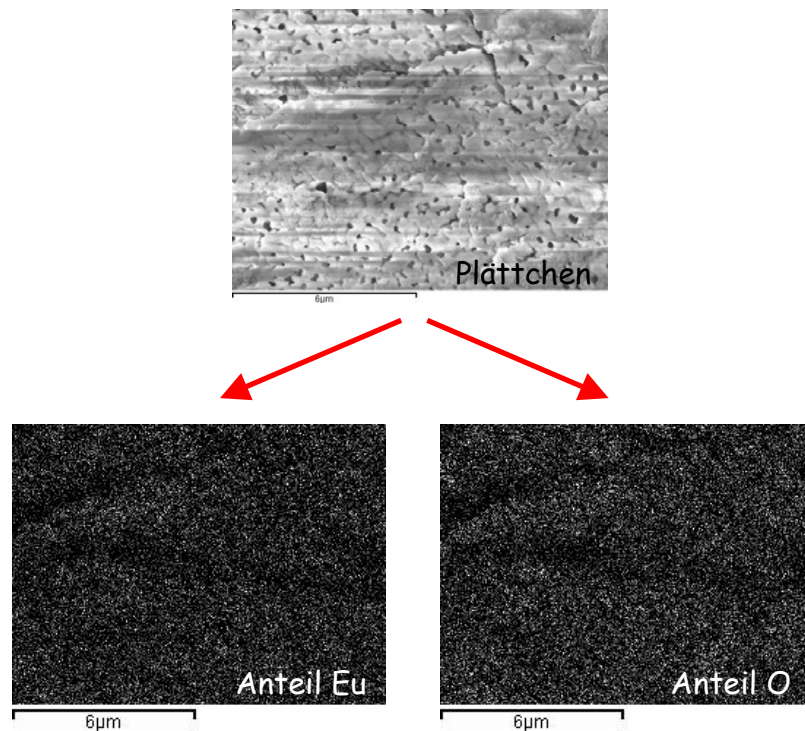


Abb. 126 : REM und EDX Aufnahmen von Eu_2O_3 .

Bei höherer Vergrößerung erkennt man eine Ansammlung vieler nanogroßer Teilchen in der Größenordnung von ca. 40 nm (Abb. 127).

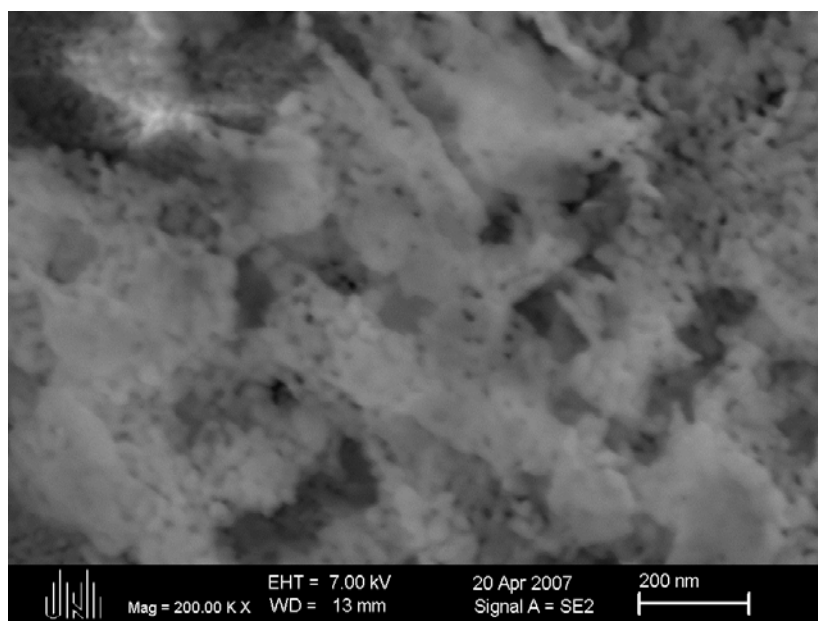
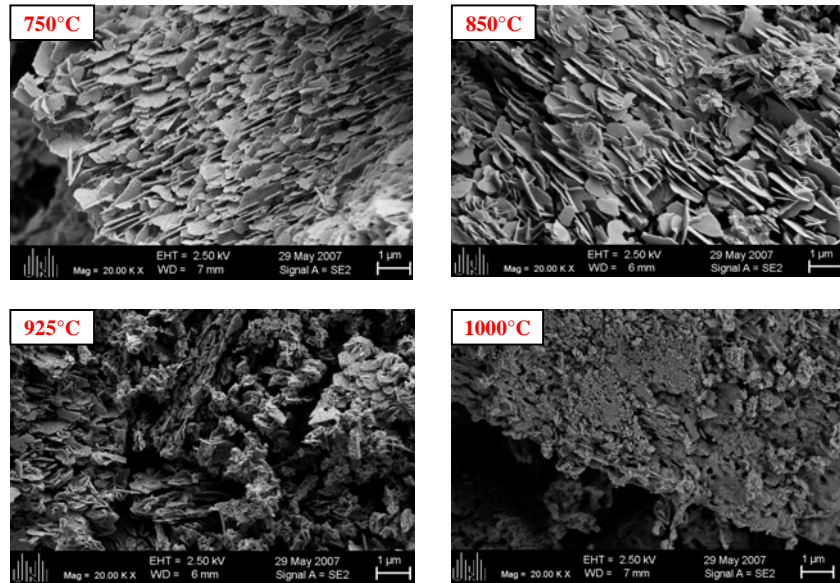


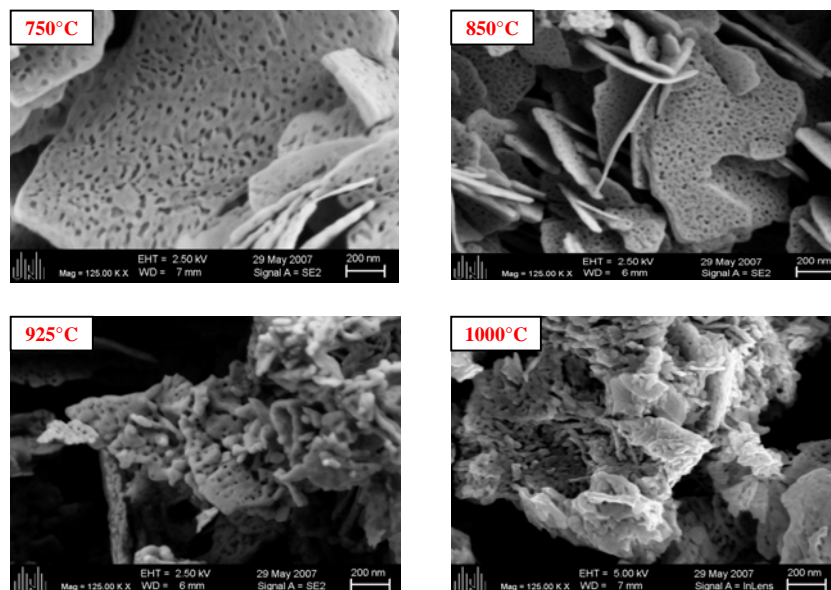
Abb. 127 : REM Aufnahme bei 200-facher Vergrößerung.

5.5.2 Temperaturabhängigkeit der Partikelgröße

Um eine Temperaturabhängigkeit der Partikelgröße feststellen zu können, sind mehrere Proben von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ in evakuierte Kieselglasampullen abgeschmolzen worden. Die Glasampullen sind dann in vorgeheizten Öfen bei 750, 850, 925 und 1000°C eingebracht und nach 2 Minuten wieder dem Ofen entnommen worden.



Maßstab: 1 µm

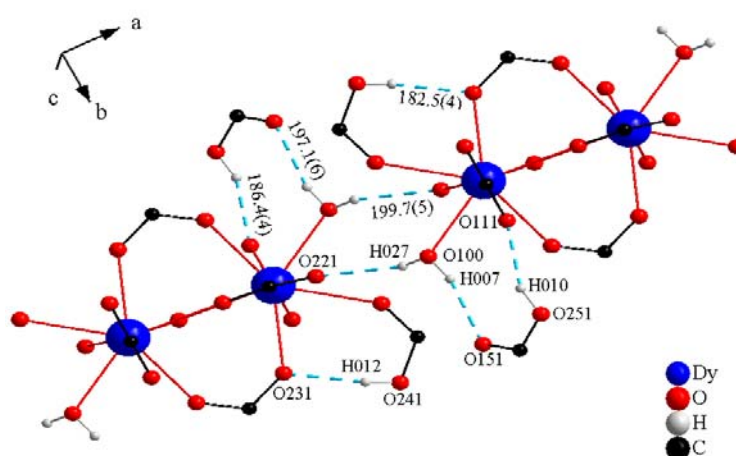


Maßstab: 2 nm

Abb. 128 : REM–Aufnahmen bei 20(oben)- und 125(unten)-facher Vergrößerung von Eu_2O_3 durch Zersetzung von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$.

Die REM–Aufnahmen zeigen deutlich eine optische Veränderung des Zersetzungsproduktes an. Bei 20facher Vergrößerung (Abb. 128, oben) geht man von Plättchenbildung bei 750°C, über zu Bildung kleiner Aggregate bei 850°C und zu überwiegender Bildung von kleineren Aggregaten 925°C bzw. 1000°C. Bei 125facher Vergrößerung (Abb. 128, unten) erkennt man erneut die Porosität der Plättchen und die abnehmende Teilchengröße. Die Plättchen sind zu Anfang noch bis zu 1 µm lang und werden zu höheren Temperaturen kleiner bis hin zu Aggregaten aus ca. 60 nm großen Teilchen.

Bei der Umsetzung von Essigsäure mit verschiedenen Seltenerdmetallen konnten mit unterschiedlichen Stöchiometrien die Acetate $\text{SE}(\text{OAc})_3$ mit $\text{SE} = \text{Nd}, \text{Eu}, \text{Tm}, \text{Yb}$, die Acetathydrate $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ mit $\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Er}$ und $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ und die Acetat-Essigsäure-Addukte $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_2$ mit $\text{SE} = \text{Nd}, \text{Sm}$ und $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$ als Einkristalle erhalten werden (Tabelle 47). Mit Ausnahme von $\text{Nd}(\text{OAc})_3$, bestehend aus Schichten, und $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})(\text{HOAc})_3$, bestehend aus Dimeren, bauen alle anderen Verbindungen Kettenstrukturen auf. Durch koordinierende bzw. eingelagerte Wasser- und/oder Essigsäuremoleküle wirken Wasserstoffbrückenbindungen stabilisierend auf die Struktur ein (Abb. 129).



177

Tabelle 47. Strukturdaten und die wichtigsten Atomabstände von Seltenerdacetaten.

Verbindung	Strukturdaten und -merkmale	Atomabstände in [pm]
Nd(OAc) ₃	a = 2201,7(2), b = 1849,9(2), c = 2419,0(3) pm, $\beta = 96,1(3)^\circ$, V = 9796,8(1)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0430 [I>2 σ (I)] monoklin, P2 ₁ /a, CN = 8 und 9, Schichtstruktur	<d _{Nd-Nd} > = 412,4 <d _{Nd-O} > = 249,2
Eu(OAc) ₃	a = 1126,0(3), b = 2900,5(6), c = 799,1(2) pm, $\beta = 132,0(1)^\circ$, V = 1938,6(8)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0374 [I>2 σ (I)] monoklin, C2/c, CN = 8, Kettenstruktur	d _{Eu-Eu} = 400,0(1) <d _{Eu-O} > = 242,4
SE(OAc) ₃ , SE = Tm, Yb	Tm: a = 828,1(1), b = 1397,74(5), c = 831,5(4) pm, V = 962,5(2)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0176 [I>2 σ (I)] Yb: a = 1387,8(2), b = 829,3(2), c = 822,4(9) pm, V = 946,5(3)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0237 [I>2 σ (I)] orthorhombisch, Ccm2 ₁ , CN = 7, Kettenstruktur	d _{Tm-Tm} = 423,2(1) <d _{Tm-O} > = 228,5 d _{Yb-Yb} = 420,3(1) <d _{Yb-O} > = 228,6
SE(OAc) ₃ (H ₂ O) _{0,5} , SE = Nd, Sm	Nd: a = 1620,7(2), b = 1711,8(2), c = 861,7(2) pm, $\beta = 119,2(2)^\circ$, V = 2086,5(4)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0214 [I>2 σ (I)] Sm: a = 1611,2(3), b = 1705,7(1), c = 860,9(9) pm, $\beta = 118,6(4)^\circ$, V = 2076,7(3) 10 ⁶ ·pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0285 [I>2 σ (I)] monoklin, Cc, CN = 9, Kettenstruktur	d _{Nd-Nd} = 389,7(1) <d _{Nd-O} > = 250,0 d _{Sm-Sm} = 388,1(8) <d _{Sm-O} > = 248,0
SE(OAc) ₃ (H ₂ O) _x , SE = Er x = 0,5, Eu x = 1,5	Er: a = 1587,7(3), b = 1650,3(8), c = 838,0(5) pm, $\beta = 115,9(8)^\circ$, V = 1974,0(2)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0272 [I>2 σ (I)] Sm: a = 1608,7(2), b = 1665,6(2), c = 839,1(9) pm, $\beta = 115,7(6)^\circ$, V = 2025,2(4)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0424 [I>2 σ] monoklin, Cc, CN = 8 und 9, Kettenstruktur	d _{Er-Er} = 395,8(3) <d _{Er-O} > = 238,2 d _{Eu-Eu} = 401,6(1) <d _{Eu-O} > = 243,7
SE(OAc) ₃ (HOAc) ₂ SE = Nd, Sm	Nd: a = 770,6(1), b = 954,2(6), c = 1169,9(2) pm, $\alpha = 103,2(9)$, $\beta = 104,7(5)$, $\gamma = 101,3(9)^\circ$, V = 779,1(2)·10 ⁶ pm ³ , Z = 2 und R ₁ = 0,0338 [I>2 σ (I)] Sm: a = 753,4(1), b = 915,5(1), c = 1194,7(2) pm, $\alpha = 88,6(3)$, $\beta = 74,3(1)$, $\gamma = 89,1(7)^\circ$, V = 793,0(2)·10 ⁶ pm ³ , Z = 2 und R ₁ = 0,0373 [I>2 σ (I)] triklin, P $\bar{1}$, CN = 9, Kettenstruktur	d _{Nd-Nd} = 402,3(7) <d _{Nd-O} > = 250,8 d _{Sm-Sm} = 391,6(7) <d _{Sm-O} > = 246,5
Dy(OAc) ₃ (H ₂ O) (HOAc) ₃	a = 896,6(1), b = 2123,4(3), c = 1155,9(3) pm, $\beta = 110,1(8)^\circ$, V = 2065,5(5)·10 ⁶ pm ³ , Z = 4 und R ₁ = 0,0354 [I>2 σ (I)] monoklin, P2 ₁ /a, CN = 9, Struktur aus Dimeren	d _{Dy-Dy} = 394,1(2) <d _{Dy-O} > = 241,6

Bis auf jenen des Neodymacetats sind bereits alle Strukturtypen der Seltenerdacetate, $\text{SE}(\text{OAc})_3$, bekannt; sie sind als Raumnetz- bzw. Kettenstrukturen aufgebaut. $\text{Nd}(\text{OAc})_3$ kristallisiert hingegen in einer Schichtstruktur mit zehn röntgenographisch unterschiedlichen Neodymlagen, acht- und neunfach koordiniert (Abb. 130).

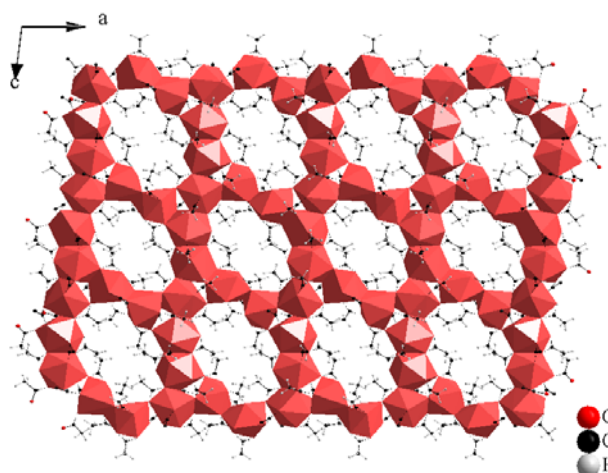


Abb. 130 : Polyedrische Darstellung einer Schicht entlang [010] in $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

$\text{SE}(\text{OAc})_3$ mit $\text{SE} = \text{Eu}, \text{Tm}, \text{Yb}$ waren bisher nur aus Pulvern mit Hilfe von Röntgen-Aufnahmen charakterisiert und dem jeweiligen Strukturtyp zugeordnet worden. Durch Röntgenstrukturanalyse an Einkristallen konnte diese Zuordnung nun bestätigt werden. Wie aus der Übersicht in Tabelle 48 ersichtlich wird, nimmt mit abnehmendem Radius des Seltenerdatoms die Koordinationszahl von 10 bei Lanthan bis hin zu 7 bei Lutetium ab. Außerdem reduziert sich die „Dimensionalität“ der Struktur vom Raumnetz bei Lanthan, über Schichten bei Neodym zu Ketten ab Samarium (Abb. 131).

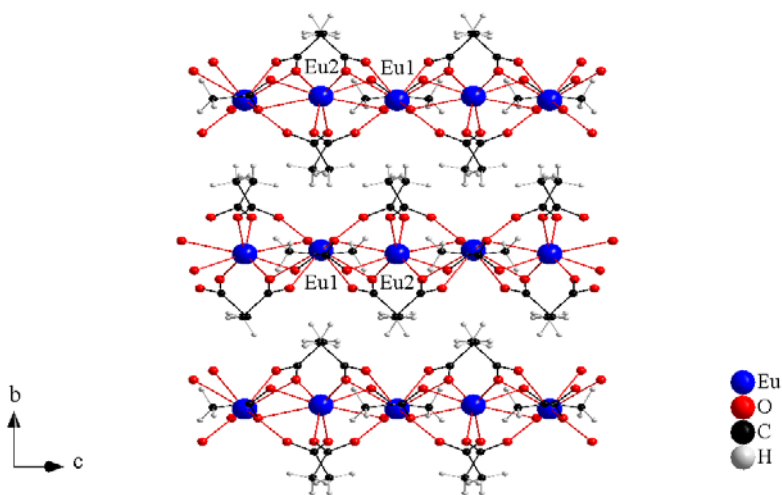


Abb. 131 : Perspektivische Darstellung von übereinander liegenden Ketten in $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

Tabelle 48. Übersicht und Beschreibung aller Kristallmodifikationen der Seltenerdacetate $\text{SE}(\text{OAc})_3$.

Kristalltyp von $\text{SE}(\text{OAc})_3$	Raumgruppe und Strukturmerkmale	Atomabstände in [pm]
Sc-Typ, M = Sc ^[1]	hexagonal, $P6_3/mcm$, CN = 6, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Sc-Sc}} \rangle = 443,3$ $d_{\text{Sc-O}} = 208,4(1)$
La-Typ, M = La ^[2] , Ce	trigonal, $R\bar{3}$, CN = 10, Raumnetzstruktur	$\langle d_{\text{La-La}} \rangle = 427,2$ $\langle d_{\text{La-O}} \rangle = 261,5$
Pr-Typ, M = Pr ^[3]	tetragonal, $P42_1c$, CN = 9, 10, Raumnetzstruktur	$\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 416,7$ $\langle d_{\text{Pr-O}} \rangle = 256,7$
Nd-Typ, M = Nd ^[5]	monoklin, $P2_1/a$, CN = 8,9, Schichtstruktur	$\langle d_{\text{Nd-Nd}} \rangle = 412,4$ $\langle d_{\text{Nd-O}} \rangle = 249,2$
Ho-Typ, M = Sm-Er, Y ^[4]	monoklin, $C2/c$, CN = 8, Kettenstruktur	$d_{\text{Ho-Ho}} = 393,7(1)$ $\langle d_{\text{Ho-O}} \rangle = 237,6$
Lu-Typ, M = Tm-Lu ^[4]	orthorhombisch, $Ccm2_1$, CN = 7, Kettenstruktur	$d_{\text{Lu-Lu}} = 419,3(5)$ $\langle d_{\text{Lu-O}} \rangle = 227,5$

Zwischen den Strukturen des Acetats $\text{SE}(\text{OAc})_3$ und des Acetathydrats $\text{SE}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ von Europium besteht ein direkter Zusammenhang. Das Verknüpfungsmuster zwischen den Europiumatomen ist bei beiden identisch. Durch den Einbau eines koordinierenden Wassermoleküls an jedes zweite Europiumatom wird aus der nahezu linearen Kettenstruktur in $\text{Eu}(\text{OAc})_3$ mit $\varphi_{(\text{Eu}1, \text{Eu}2, \text{Eu}1)} = \varphi_{(\text{Eu}2, \text{Eu}1, \text{Eu}2)} = 174,9(4)^\circ$ eine gewellte Kettenstruktur in $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ mit $\varphi_{(\text{Eu}1, \text{Eu}1, \text{Eu}1)} = 129,1(8)^\circ$ und $\varphi_{(\text{Eu}2, \text{Eu}1, \text{Eu}2)} = 129,1(2)^\circ$ (Abb. 132).

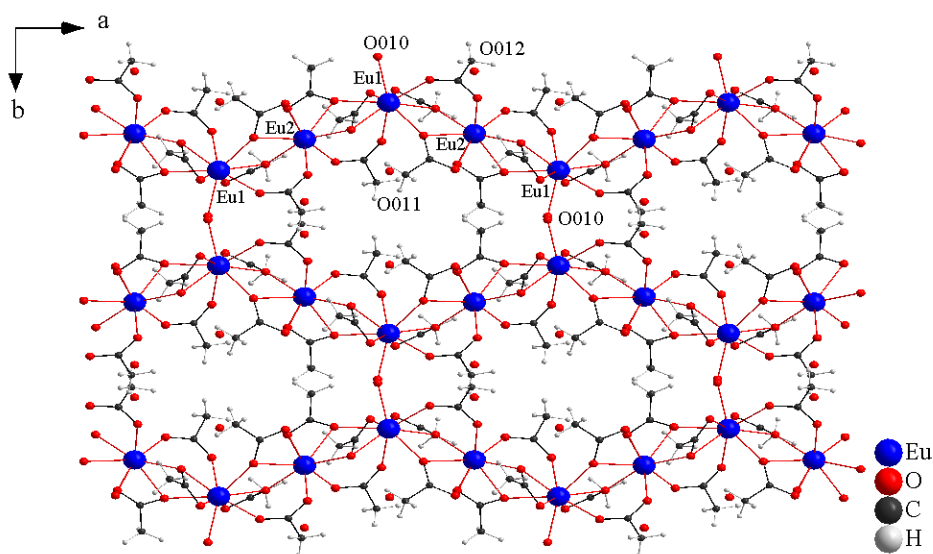


Abb. 132 : Perspektivische Darstellung von übereinander liegenden Ketten entlang $[001]$ in $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$.

Zwei Wassermoleküle sind zwischen den Ketten zusätzlich eingelagert. Das koordinierende Wassermolekül ist stets am Maximum und Minimum der Welle einer Kette lokalisiert. Übereinander liegende Ketten ordnen sich zueinander so an, dass sich Maximum und Minimum (sowie umgekehrt) je einer Kette gegenüberliegen, um über das koordinierende Wassermolekül Wasserstoffbrückenbindungen eingehen zu können (Abb. 133).

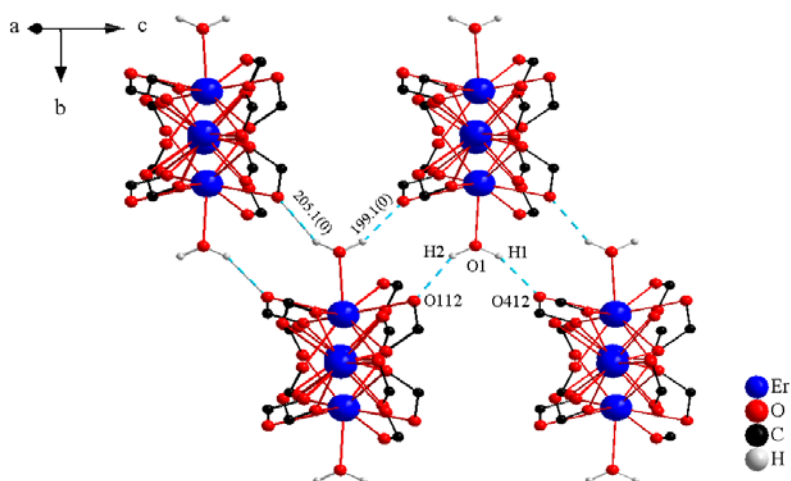


Abb. 133 : Perspektivische Darstellung der Wasserstoffbrücken in $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Aus der Umsetzung mit Propionsäure mit Eisen konnte das Eisenpropionat $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ bzw. mit Neodym das Neodympropionatsolvat $\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})_2$ hergestellt werden (Tabelle 49).

Tabelle 49. Strukturdaten und wichtigsten Atomabstände der hergestellten Propionate.

Verbindung	Strukturdaten und -merkmale	Atomabstände in [pm]
$\text{Fe}(\text{OPr})_2$	$a = 2349,9(3)$, $c = 4475,7(7)$ pm, $V = 21403(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 30$ und $R_1 = 0,0934$ [$I > 2\sigma(I)$] trigonal, $R\bar{3}c$, CN = 6, Raumnetzstruktur	$\langle d_{\text{Fe-Fe}} \rangle = 332,2$ $\langle d_{\text{Fe-O}} \rangle = 212,7$
$\text{Nd}(\text{OPr})_3(\text{HOPr})_2$	$a = 1193,9(8)$, $b = 1228,2(8)$, $c = 1346,3(1)$ pm, $\alpha = 105,5(5)$, $\beta = 96,4(5)$, $\gamma = 113,7(9)^\circ$, $V = 1685,1(4) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0352$ [$I > 2\sigma(I)$] triklin, $P\bar{1}$, CN = 9, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Nd-Nd}} \rangle = 407,8$ $\langle d_{\text{Nd-O}} \rangle = 249,6$

$\text{Fe}(\text{OPr})_2$ baut eine dreidimensionale Netzstruktur auf, mit drei röntgenographisch unterschiedlichen Eisenlagen, bestehend aus $(\text{Fe}_{1,2})_{12}$ -Ringen, die über Fe3 zu weiteren Ringen verknüpft werden (Abb.134).

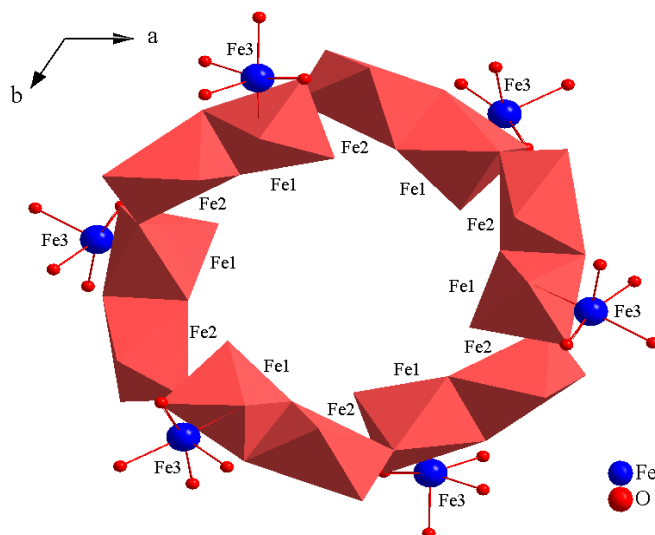


Abb. 134 : Perspektivische Darstellung eines Fe_{12} -Ringes in $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

Aus diesen parallel (100) und (010) gebildeten Flächen mit verknüpften Ringen entstehen entlang [001] hexagonal angeordnete Kanäle. Diese Kanäle werden größtenteils durch den aliphatischen Rest der Propionateinheiten ausgefüllt. Der zurückbleibende Hohlraum hat einen Durchmesser von 1782,2(8) bis 2280,5(9) pm (Abb. 135).

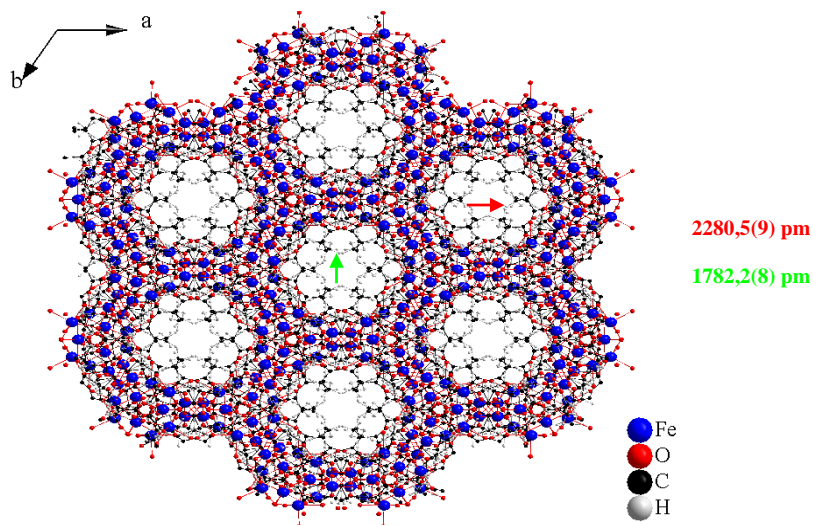


Abb. 135 : Perspektivische Darstellung der entlang [001] verlaufenden Kanäle in $\text{Fe}(\text{OPr})_2$.

Durch Umsetzung mit Benzoesäure konnten folgende Verbindungen erhalten werden (Tabelle 50): $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$, $\text{Fe}(\text{OBz})_2$, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$, $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$, $\text{Gd}(\text{OBz})_3$. $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ und $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ konnten nicht auf direktem Wege durch Wahl der entsprechenden Stöchiometrie hergestellt werden. Sie wurden aus einem Benzoesäure–Salicylsäure–Reaktionsgemisch als einziges, kristallines Produkt erhalten. Alle erwähnten Benzoate bauen eine nicht-lineare Kettenstruktur auf, deren Besonderheiten nun im Einzelfall hervorgehoben werden.

$\text{Fe}(\text{OBz})_2$ enthält zwei röntgenographisch unterschiedliche Eisenlagen, beide sechsfach koordiniert. Fe1 ist oktaedrisch umgeben, während Fe2 ein für Fe^{2+} ungewöhnliches Polyeder bildet. Dieses lässt sich durch die beiden sperrigen, verbrückenden $4\Delta, \mu_2$ -Benzoatanionen erklären, die beide chelatisierend an Fe2 koordinieren und dieses zu den benachbarten Fe1-Atomen verbrücken (Abb. 136). Dieses Verknüpfungsmuster führt zu einer wellenartigen Struktur mit $\varphi_{(\text{Fe1}, \text{Fe2}, \text{Fe1})} = 109,5(3)^\circ$.

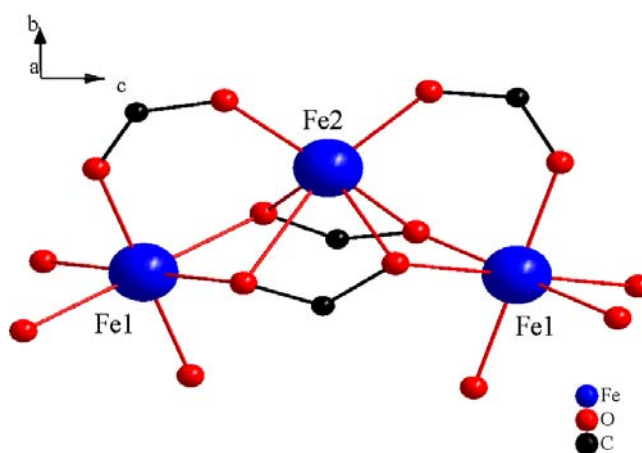


Abb. 136 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Fe^{2+} in $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Aufgrund des relativ kurzen, mittleren Eisen–Eisen–Abstandes von 325,8 pm ist das magnetische Verhalten temperaturabhängig untersucht worden. $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ weist antiferromagnetische Wechselwirkungen auf mit einer paramagnetischen Curie-Temperatur von $\Theta_p = -32 \text{ K}$.

Tabelle 50. Strukturdaten und die wichtigsten Atomabstände von Benzoaten.

Verbindung	Strukturdaten und -merkmale	Atomabstände in [pm]
$\text{Fe}(\text{OBz})_4$	$a = 1703,6(3)$, $b = 1422,2(3)$, $c = 1064,5(2)$ pm, $\beta = 94,7(1)^\circ$, $V = 2570,4(7) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0443 [I > 2\sigma(I)]$ monoklin, $C2/c$, CN = 6, Schichtstruktur	$\langle d_{\text{Fe-Fe}} \rangle = 325,8$ $\langle d_{\text{Fe-O}} \rangle = 216,4$
$\text{Pr}(\text{OBz})_3$	$a = 1944,7(6)$, $b = 1362,0(1)$, $c = 1539,0(1)$ pm, $\beta = 108,4(8)^\circ$, $V = 3866,2(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0288 [I > 2\sigma(I)]$ monoklin, $P2_1/a$, CN = 8 und 9, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 399,0$ $\langle d_{\text{Pr-O}} \rangle = 250,7$
$\text{Gd}(\text{OBz})_3$	$a = 1146,9(5)$, $b = 2261,5(4)$, $c = 2278,9(2)$ pm, $\beta = 95,2(9)^\circ$, $V = 5886,1(8) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0370 [I > 2\sigma(I)]$ monoklin, $P2_1/n$, CN = 6 - 8, helikale Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Gd-Gd}} \rangle = 430,7$ $\langle d_{\text{Gd-O}} \rangle = 235,1$
$\text{Ho}(\text{OBz})_3$	$a = 1135,8(4)$, $b = 2276,4(3)$, $c = 2269,3(3)$ pm, $\alpha = 90,4(9)$, $\beta = 90,7(8)$, $\gamma = 93,8(9)^\circ$, $V = 5853,3(12) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0741 [I > 2\sigma(I)]$ triklin, $P\bar{1}$, CN = 6 - 8, helikale Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Ho-Ho}} \rangle = 432,3$ $\langle d_{\text{Ho-O}} \rangle = 231,3$
$\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$	$a = 1394,7(7)$, $b = 1409,3(5)$, $c = 1541,3(2)$ pm, $\alpha = 105,7(4)$, $\beta = 99,7(4)$, $\gamma = 109,3(8)^\circ$, $V = 2636,5(6) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 1$ und $R_1 = 0,0395 [I > 2\sigma(I)]$ triklin, $P\bar{1}$, CN = 6, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Mn-Mn}} \rangle = 342,4$ $\langle d_{\text{Mn-O}} \rangle = 218,8$
$\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$	$a = 975,4(7)$, $b = 2485,9(1)$, $c = 2653,1(4)$ pm, $V = 6433,7(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 8$ und $R_1 = 0,0588 [I > 2\sigma(I)]$ orthorhombisch, $Pcnn$, CN = 8, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 487,8$ $\langle d_{\text{Pr-O}} \rangle = 246,4$
$\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$	$a = 703,9(1)$, $b = 2850,7(3)$, $c = 2268,8(3)$ pm, $\beta = 92,5(5)^\circ$, $V = 4548,1(9) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 4$ und $R_1 = 0,0529 [I > 2\sigma(I)]$ monoklin, $P2_1/n$, CN = 8 und 10, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Eu-Eu}} \rangle = 368,4$ $\langle d_{\text{Eu-O}} \rangle = 244,8$
$\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$	$a = 1381,8(5)$, $b = 1373,5(7)$, $c = 1470,5(4)$ pm, $\alpha = 67,4(7)$, $\beta = 64,3(3)$, $\gamma = 66,7(3)^\circ$, $V = 2233,9(5) \cdot 10^6 \text{ pm}^3$, $Z = 2$ und $R_1 = 0,0333 [I > 2\sigma(I)]$ triklin, $P\bar{1}$, CN = 8 und 9, Kettenstruktur	$\langle d_{\text{Eu-Eu}} \rangle = 399,5$ $\langle d_{\text{Eu-O}} \rangle = 241,6$

$\text{Gd}(\text{OBz})_3$ und $\text{Ho}(\text{OBz})_3$ bauen beide eine helikale Kettenstruktur auf, in denen benachbarte Ketten als links- und rechtsdrehend bezeichnet werden können (Abb. 137). Beide Strukturen enthalten Metalllagen mit Koordinationszahlen zwischen 6 und 8.

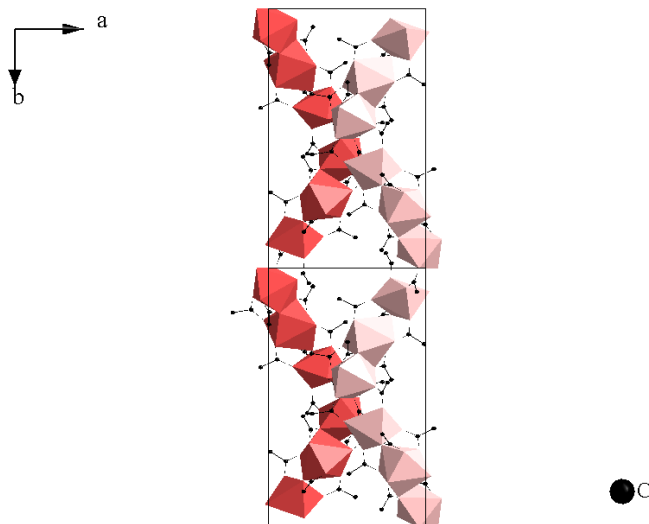


Abb. 137 : Polyedrische Darstellung benachbarter Ketten entlang [001] in $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

$\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ baut eine Struktur aus Ketten auf, die vier röntgenographisch unterschiedliche, sechsfach koordinierte Manganatome enthalten. Die Ketten enthalten $(\text{Mn}_{1,2,3})_6$ -Ringe, die über Mn_4 verbrückt werden. Übereinander liegende Ketten sind zueinander versetzt, um eine dichte Packung zu bilden. Das Benzoesäuremolekül koordiniert ausschließlich an Mn_2 und füllt den Raum zwischen den Ketten aus (Abb. 138).

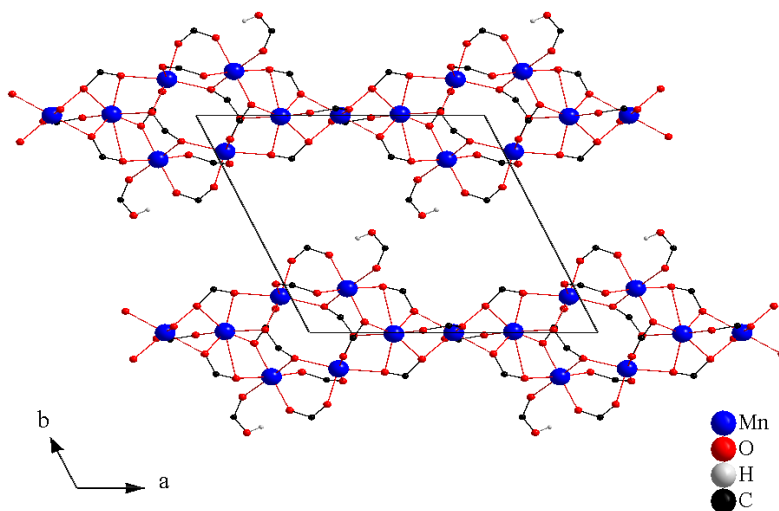


Abb. 138 : Perspektivische Darstellung benachbarter Ketten in $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Aufgrund des relativ kurzen, mittleren Mangan–Mangan–Abstandes von 342,4 pm ist das magnetische Verhalten temperaturabhängig untersucht worden. $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$ weist antiferromagnetische Wechselwirkungen auf mit einer paramagnetischen Curie-Temperatur von $\Theta_p = -30$ K.

$\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ ist eine gemischtvalente Verbindung, die zwei röntgenographisch unterschiedliche Europiumlagen enthält, acht- und neunfach koordiniert. Die Ketten sind mit $\varphi(\text{Eu1}, \text{Eu2}, \text{Eu1}) = 145,6(1)^\circ$ gewellt. Das Benzoesäuremolekül koordiniert stets an Eu1 und geht intramolekulare Wasserstoffbrückenbindungen ein (Abb. 139).

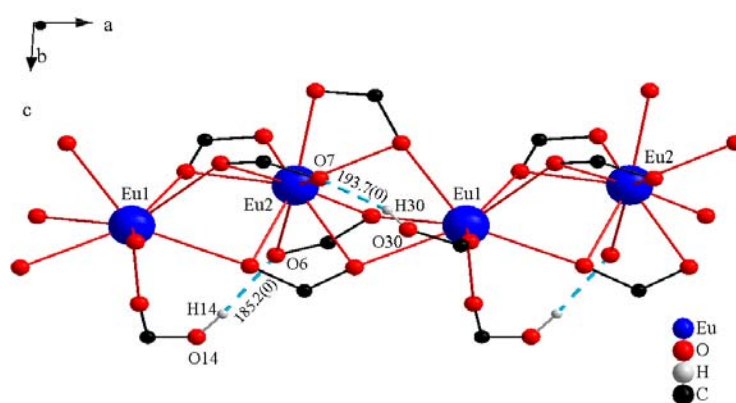


Abb. 139 : Perspektivische Darstellung der Umgebung von Eu in $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Die Ketten sind in einer hexagonalen AB-Stapelfolge entlang [001] angeordnet (Abb. 140). Diese hexagonale Anordnung der Stränge ist ein typisches Merkmal bei allen bereits erwähnten Kettenstrukturen.

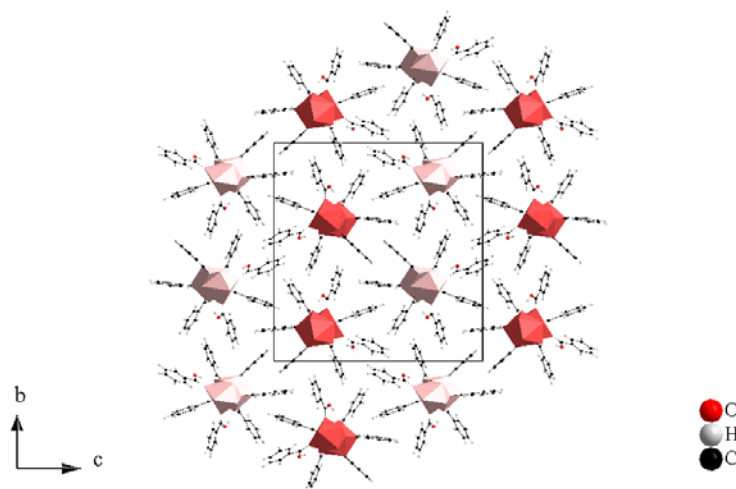


Abb. 140 : Polyedrische Darstellung von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ entlang [100].

Das temperaturabhängig untersuchte, magnetische Verhalten von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ weist eine ungewöhnliche, leichte Krümmung in der Linearität der Curie-Weiss-Gerade auf. Die durch Extrapolation dieser Krümmung bestimmte paramagnetischen Curie-Temperatur von $\Theta_p = -6,5 \text{ K}$ lässt auf geringe antiferromagnetische Wechselwirkungen bei tiefen Temperaturen schließen.

Im Vergleich lässt sich ein struktureller Einfluss des jeweiligen Säurerestes feststellen. So bilden das Acetat $\text{Pr}(\text{OAc})_3$ und das Propionat $\text{Fe}(\text{OPr})_2$ Raumnetzstrukturen, während die zugehörigen Benzoate $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ und $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ Kettenstrukturen aufbauen, was auf den sperrigen, aromatischen Benzolring zurückzuführen ist. Aufgrund der geringeren Flexibilität der Benzoatgruppe nimmt der Metall-Metall-Abstand vom aliphatischen zum aromatischen Säurerest in beiden Fällen ab.

$\text{Fe}(\text{OPr})_2$:	$\langle d_{\text{Fe-Fe}} \rangle = 332,2 \text{ pm}$	$\text{Pr}(\text{OAc})_3$:	$\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 416,7 \text{ pm}$
$\text{Fe}(\text{OBz})_2$:	$\langle d_{\text{Fe-Fe}} \rangle = 325,8 \text{ pm}$	$\text{Pr}(\text{OBz})_3$:	$\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 399,0 \text{ pm}$

Das Einführen eines koordinierenden Säuremoleküls, das keine verbrückende Funktion besitzt und somit einen größeren Raumanpruch einnimmt, vergrößert, wie zu erwarten, den Metall-Metall-Abstand, z.B. $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ mit $\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 399,0 \text{ pm}$ und $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ mit $\langle d_{\text{Pr-Pr}} \rangle = 487,8 \text{ pm}$.

Das thermische Verhalten von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ wurde im Temperaturbereich zwischen 0 und 220°C untersucht. Die ersten beiden Verbindungen weisen reversible Wärmeübergänge auf, während die Europiumverbindung einen irreversiblen Glasübergang zeigt. Zusätzlich tritt bei $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$ ein Wärmeübergang bei ca. 120°C auf, der auf die Abgabe der beiden koordinierenden Benzoessäuremoleküle zurückzuführen ist.

Die Europiumverbindungen $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ und $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$ zeigen beide Lumineszenz auf. $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ erwies sich zusätzlich als gutes Ausgangsmaterial zur Herstellung von nanometergroßen Partikeln unter schneller Zersetzung zum Europiumoxid Eu_2O_3 .

7 Literaturverzeichnis

- [1] G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, in Druck, **2007**.
- [2] R. Fuchs, J. Strähle, *Z. Naturforsch.*, 39b, 1662 – 1663, **1984**.
- [3] D. Gieseke-Vollmer, G. Meyer, *Z. anorg. allg. Chem.*, 619, 1603 – 1608, **1993**.
- [4] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 619, 1609 – 1615, **1993**.
- [5] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 620, 438 – 443, **1994**.
- [6] S. Gomez Torres, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 633, eingereicht, **2007**.
- [7] S. Gomez Torres, I. Panteburg, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 632, 1989 – 1994, **2006**.
- [8] P. Lobinger, H. W. Roesky, *Inorg. Chem.*, 44, 9192 – 9196, **2005**.
- [9] S. Ganapathy, R. G. Bryant, *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 108, 3159 – 3165, **1986**.
- [10] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Naturforsch.*, 47b, 1602, **1992**.
- [11] R. Baggio, *Acta Cryst.*, C58, m498-m500, **2002**.
- [12] D. Deiters, *Dissertation*, Universität Hannover, **1995**.
- [13] A. Lossin, G. Meyer, *Z. Naturforsch.*, 47b, 179 – 182, **1992**.
- [14] S. Gomez Torres, *Diplomarbeit*, Universität Köln, **2005**.
- [15] a) S. Gomez Torres, G. Meyer, *Z. Krist. Suppl.*, 24, 155, **2006**. b) S. Gomez Torres, G. Meyer *14. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.*, Freiburg, Deutschland 3.4 – 6.4., **2006**.
- [16] E. Goldschmied, A. D. Rae, *Acta Cryst.*, B33, 2117 – 2120, **1977**.
- [17] T. Lis, *Acta Cryst.*, B33, 2964 – 2966, **1977**.
- [18] M. Spohn, J. Strähle, *Z. Naturforsch.*, 43b, 540 – 546, **1988**.
- [19] S. Gomez Torres, G. Meyer, *Inorg. Chem.* nicht veröffentlicht.

- [20] S. Gomez Torres, J. Sierau, G. Meyer, *15. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.*, Bremen, Deutschland 5.3 – 9.3.2007.
- [21] S. Gomez Torres, G. Meyer, *15. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.*, Bremen, Deutschland 5.3 – 9.3.2007.
- [22] T. Kawatta, H. Uekusa, S. Ohba, *Acta Cryst.*, B 48, 253 – 261, **1992**.
- [23] M. Spohn, J. Strähle, W. Hiller, *Z. Naturforsch.*, 41b, 541 – 547, **1986**.
- [24] F. A. Cotton, M. W. Extine, G. W. Rice, *Inorg. Chem.*, 17, 176 – 186, **1978**.
- [25] S. Gomez Torres, G. Meyer, *6th International Conference on f-elements*, Wroclaw, Polen 4.9 – 9.9.2006.
- [26] S. Gomez Torres, G. Meyer, *J. Alloys Compd.*, im Druck, **2007**.
- [27] S. Gomez Torres, G. Meyer, *XIX Tage der Seltenen Erden, Terrae Rarae 2006*, Oldenburg 29.11 – 2.12.2006.
- [28] S. Gomez Torres, G. Meyer, *Inorg. Chem.*, nicht veröffentlicht.
- [29] W. Massa, *Kristallstrukturbestimmung*, 3. Aufl., B. G. Teubner, Stuttgart/ Leipzig/ Wiesbaden, **2002**.
- [30] H. Naumer, W. Heller, *Untersuchungsmethoden in der Chemie*, 3. Aufl., Georg Thieme Verlag Stuttgart, **1997**.
- [31] J. Weidlein, *Schwingungsspektroskopie*, 2. überarb. Aufl., Georg Thieme Verlag, Stuttgart, **1988**.
- [32] M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, *Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie*, 7. Aufl., Thieme, Stuttgart, **2005**.
- [33] G. Widmann, R. Riesen, *Thermoanalyse*, 3. Aufl., Hüthig Buch Verlag, Heidelberg, **1990**.
- [34] W.F. Hemminger, H.K. Cammenga, *Methoden der Thermischen Analyse*, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, **1989**.

- [35] Flegler, Heckmann, Elektronenmikroskopie – Grundlagen, Methoden, Anwendungen, Spektrum Akademischer Verlag, **1995**.
- [36] F. Eggert, Standardfreie Elektronenstrahl – Mikroanalyse mit dem EDX im Rasterelektronenmikroskop, BoD, Norderstedt, **2005**.
- [37] G. Wedler, *Lehrbuch der physikalischen Chemie*, 4. Aufl, Wiley-VCH, Weinheim, **1997**.
- [38] A. Altomare, G. Cascarano, *J. Appl. Crystallogr.*, 27, 435, **1994**.
- [39] G.M. Sheldrick, SHELXL-97, Programs for Crystal Structure and Refinement, Göttingen, **1997**.
- [40] X-SHAPE 1.01, *Crystal Optimization for Absorption Correction*, STOE & Cie GmbH, Darmstadt, **1996**; X-RED 1.22, *Stoe Data Reduction Program (C)*, Stoe & Cie GmbH, Darmstadt, **2001**.
- [41] Liebig, *Experimentalchemie* (Mitschrift von A. Kekulé), 74, **1848**.
- [42] Morrison/Boyd, *Lehrbuch der Organischen Chemie*, 3. Aufl., VCH, Weinheim. **1986**.
- [43] H. Hart, *Organische Chemie*, VCH, **1989**.
- [44] <http://de.wikipedia.org/wiki/>
- [45] A. Ouchi, Y. Suzuki, Y. Ohki, Y. Koizumi, *Coord. Chem. Rev.*, 92, 29, **1988**.
- [46] J. Ebert, *IRTRAINS*, Verlag Leverkusen, **1992**.
- [47] W. Haberlditzl, *Magnetochemie*, (Berlin: Akademie), **1962**.
- [48] G. Wipff, I. Billard, C. Gaillard, *Inorg. Chem.*, 44, 8355, **2005**.

8 Anhang (Atomkoordinaten, äquivalente und anisotrope Temperaturfaktoren, Atomabstände und Winkel)

8.1 Acetate

8.1.1 Neodymacetat, Nd(OAc)₃

Tabelle 51. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von Nd(OAc)₃.

Atom	x	y	z	Ueq
Nd1	0,37397(4)	0,23071(4)	0,22056(3)	0,02152(18)
Nd2	0,52947(4)	0,29761(4)	0,17401(3)	0,02162(18)
Nd3	0,84892(4)	0,25888(4)	0,88245(3)	0,02150(18)
Nd4	0,85736(4)	0,24712(4)	0,71221(3)	0,02276(19)
Nd5	0,34789(4)	0,22085(4)	0,38521(3)	0,02027(18)
Nd6	0,69845(4)	0,30737(4)	0,75632(3)	0,02173(19)
Nd7	0,88170(4)	0,25984(4)	1,04959(3)	0,02222(18)
Nd8	0,69420(4)	0,29512(4)	0,26765(3)	0,02191(18)
Nd9	0,38742(4)	0,26192(4)	0,54639(3)	0,02092(18)
Nd10	0,53596(4)	0,28121(4)	0,66475(3)	0,02289(18)
O11	0,4647(5)	0,3134(5)	0,2500(3)	0,020(2)
O12	0,7643(4)	0,3214(5)	0,6811(4)	0,022(2)
O13	0,3002(4)	0,2526(5)	0,4690(4)	0,024(2)
O14	0,4924(5)	0,3032(6)	0,5674(4)	0,029(3)
O15	0,3274(4)	0,1902(5)	0,1283(4)	0,024(2)
O16	0,5830(5)	0,3496(6)	0,5887(4)	0,033(3)
O17	0,6154(4)	0,3696(5)	0,2116(4)	0,025(2)
O18	0,3962(5)	0,3129(5)	0,1411(4)	0,024(2)
O19	0,9651(5)	0,2064(6)	0,7386(4)	0,031(3)
O20	0,5852(4)	0,2465(5)	0,2612(3)	0,020(2)
O21	0,6066(5)	0,3678(5)	0,7175(4)	0,024(2)
O22	0,4352(4)	0,2283(6)	0,4623(4)	0,024(2)
O23	0,6304(5)	0,2229(6)	0,7897(4)	0,036(3)
O24	0,8332(5)	0,3296(5)	0,7897(4)	0,026(3)
O25	0,6489(5)	0,3593(5)	0,3455(4)	0,028(3)
O26	0,9276(5)	0,2893(6)	0,9681(4)	0,032(3)
O27	0,8324(5)	0,3783(5)	0,9200(4)	0,028(2)
O28	0,7663(5)	0,3155(6)	0,1957(4)	0,034(3)
O29	0,8035(4)	0,2308(5)	0,9645(4)	0,024(2)
O30	0,2441(5)	0,1771(6)	0,3620(4)	0,033(3)
O31	0,6479(4)	0,2454(5)	0,6732(3)	0,025(2)
O32	0,3760(6)	0,1337(5)	0,5322(5)	0,030(3)
O33	0,4922(5)	0,2767(6)	0,0736(4)	0,030(3)
O34	0,8984(5)	0,1420(5)	1,0124(4)	0,033(3)
O35	0,3935(5)	0,3310(5)	0,6323(4)	0,030(3)
O36	0,5845(5)	0,1866(6)	0,6113(4)	0,034(3)
O37	0,7664(4)	0,2019(5)	0,7564(4)	0,026(2)
O38	0,3932(5)	0,3700(5)	0,4911(4)	0,032(3)

O39	0,7881(4)	0,2193(5)	0,2950(4)	0,026(2)
O40	0,3293(5)	0,3493(5)	0,2354(4)	0,029(3)
O41	0,4176(4)	0,2682(6)	0,3170(4)	0,033(3)
O42	0,7886(5)	0,1553(5)	0,8406(4)	0,028(2)
O43	0,8150(4)	0,2831(5)	0,6143(4)	0,025(2)
O44	0,9518(5)	0,3228(7)	0,8855(4)	0,042(3)
O45	0,4501(5)	0,1552(6)	0,3950(4)	0,038(3)
O46	0,9041(4)	0,2072(5)	0,8049(4)	0,023(2)
O47	0,2866(5)	0,3303(6)	0,5349(4)	0,037(3)
O48	0,8330(5)	0,3672(5)	1,0130(4)	0,024(2)
O49	0,8964(5)	0,1485(6)	0,9199(4)	0,034(3)
O50	0,9418(5)	0,3615(6)	1,0947(4)	0,032(3)
O51	0,3439(5)	0,1134(5)	0,4410(4)	0,029(3)
O52	0,6935(5)	0,4303(5)	0,2481(4)	0,034(3)
O53	0,5514(5)	0,1829(6)	0,7306(5)	0,041(3)
O54	0,3589(5)	0,3492(5)	0,4004(4)	0,032(3)
O55	0,3870(5)	0,0944(5)	0,2346(4)	0,037(3)
O56	0,5206(5)	0,4155(6)	0,6821(4)	0,036(3)
O57	0,6617(5)	0,3719(5)	0,8349(4)	0,030(3)
O58	0,7767(4)	0,2007(6)	1,0458(4)	0,032(3)
O59	0,3462(5)	0,1512(4)	0,3007(4)	0,024(2)
O60	0,5660(6)	0,3575(6)	0,0921(4)	0,036(3)
O61	0,4667(4)	0,1880(5)	0,1783(4)	0,024(2)
O62	0,4626(5)	0,4047(5)	0,1545(4)	0,032(3)
O63	0,7635(5)	0,4177(5)	0,7739(4)	0,033(3)
O64	0,4478(4)	0,1994(5)	0,6346(4)	0,030(2)
O65	0,6525(5)	0,1979(6)	0,3230(4)	0,033(3)
O66	0,7373(4)	0,2964(6)	0,8575(4)	0,030(3)
O67	0,3499(5)	0,3851(5)	0,6986(4)	0,040(3)
O68	0,6858(5)	0,2006(7)	0,2024(4)	0,047(3)
O69	0,6003(5)	0,2141(6)	0,1438(4)	0,042(3)
C70	0,6362(8)	0,1956(9)	0,6363(6)	0,032(4)
C71	0,4602(7)	0,3102(7)	0,3029(6)	0,020(3)
O72	0,9003(5)	0,3662(5)	0,6945(4)	0,035(3)
C73	0,5983(7)	0,1976(9)	0,2965(7)	0,033(4)
C74	0,8666(8)	0,4520(8)	0,8016(7)	0,031(4)
H74A	0,84860	0,49920	0,79730	0,139(9)
H74B	0,89860	0,44760	0,77790	0,139(9)
H74C	0,88320	0,44530	0,83960	0,139(9)
C75	0,4647(8)	0,1802(8)	0,4401(6)	0,027(4)
C76	0,4106(7)	0,3817(9)	0,1408(5)	0,026(4)
C77	0,2704(10)	0,3038(8)	0,4899(7)	0,037(5)
C78	0,8192(7)	0,3964(8)	0,7864(5)	0,025(4)
C79	0,6521(7)	0,1833(8)	0,1598(6)	0,025(4)
C80	0,6962(9)	0,3411(8)	0,8711(6)	0,035(4)
C81	0,4979(8)	0,3541(9)	0,3416(7)	0,040(5)
H81A	0,48870	0,34400	0,37870	0,139(9)
H81B	0,49020	0,40420	0,33330	0,139(9)
H81C	0,54010	0,34350	0,33860	0,139(9)
C82	0,3746(9)	0,0256(7)	0,3148(6)	0,043(5)
H82A	0,35750	0,03240	0,34930	0,139(9)
H82B	0,41730	0,01440	0,32220	0,139(9)
H82C	0,35400	-0,01350	0,29460	0,139(9)
C83	0,6956(9)	0,3556(8)	0,3776(6)	0,032(4)

C84	0,9599(9)	0,3281(8)	0,9374(7)	0,036(5)
C85	0,6995(9)	0,3863(10)	0,4336(6)	0,044(5)
H85A	0,73940	0,37750	0,45240	0,139(9)
H85B	0,66930	0,36420	0,45400	0,139(9)
H85C	0,69230	0,43750	0,43120	0,139(9)
C86	0,9675(7)	0,3642(7)	1,1438(7)	0,025(4)
C87	0,2742(8)	0,1750(8)	0,1433(7)	0,034(4)
C88	0,6891(10)	0,3527(14)	0,9325(7)	0,072(8)
H88A	0,71940	0,32500	0,95480	0,139(9)
H88B	0,64910	0,33750	0,94000	0,139(9)
H88C	0,69440	0,40310	0,94140	0,139(9)
C89	0,5560(9)	0,1377(9)	0,3070(7)	0,042(5)
H89A	0,57550	0,10610	0,33490	0,139(9)
H89B	0,54570	0,11110	0,27320	0,139(9)
H89C	0,51950	0,15730	0,31950	0,139(9)
C90	0,7312(8)	0,0834(7)	0,7738(6)	0,034(4)
H90A	0,71460	0,08880	0,73570	0,139(9)
H90B	0,69860	0,07560	0,79640	0,139(9)
H90C	0,75850	0,04290	0,77710	0,139(9)
C91	0,3764(7)	0,3903(9)	0,4419(7)	0,031(4)
C92	0,2642(7)	0,4084(8)	0,2938(7)	0,037(4)
H92A	0,23940	0,39430	0,32230	0,139(9)
H92B	0,23890	0,43030	0,26350	0,139(9)
H92C	0,29450	0,44250	0,30870	0,139(9)
C93	1,0109(11)	0,3733(12)	0,9669(8)	0,070(8)
H93A	1,01030	0,36900	1,00640	0,139(9)
H93B	1,00530	0,42300	0,95610	0,139(9)
H93C	1,04950	0,35650	0,95680	0,139(9)
C94	0,3746(7)	0,3864(10)	0,6532(6)	0,034(4)
C95	0,5257(10)	0,1534(15)	0,4750(9)	0,077(8)
H95A	0,53130	0,17900	0,50970	0,139(9)
H95B	0,55980	0,16240	0,45440	0,139(9)
H95C	0,52290	0,10250	0,48210	0,139(9)
C96	0,3584(8)	0,0920(8)	0,4909(7)	0,034(4)
C97	0,6420(7)	0,4289(8)	0,2207(6)	0,028(3)
C98	0,3669(7)	0,0934(8)	0,2809(6)	0,025(4)
C99	0,9369(7)	0,3606(8)	0,6592(6)	0,024(3)
C100	0,9686(8)	0,4262(8)	0,6391(7)	0,039(4)
H10A	0,99610	0,41160	0,61290	0,139(9)
H10B	0,99120	0,44990	0,67010	0,139(9)
H10C	0,93880	0,45890	0,62140	0,139(9)
C101	1,0072(7)	0,1640(10)	0,8312(6)	0,038(4)
H10D	1,04270	0,15640	0,81200	0,139(9)
H10E	0,99480	0,11890	0,84610	0,139(9)
H10F	1,01670	0,19790	0,86090	0,139(9)
C102	0,3585(8)	0,4321(8)	0,1256(7)	0,039(5)
H10G	0,32190	0,40480	0,11560	0,139(9)
H10H	0,36720	0,46150	0,09470	0,139(9)
H10I	0,35290	0,46260	0,15680	0,139(9)
C103	0,2260(9)	0,1398(11)	0,1070(7)	0,051(6)
H10J	0,19080	0,13310	0,12680	0,139(9)
H10K	0,24020	0,09380	0,09550	0,139(9)
H10L	0,21520	0,16960	0,07500	0,139(9)
C104	0,9545(8)	0,1943(9)	0,7899(6)	0,034(4)

C105	0,3800(8)	0,4596(8)	0,6252(8)	0,043(5)
H10M	0,36290	0,49640	0,64680	0,139(9)
H10N	0,35840	0,45830	0,58860	0,139(9)
H10O	0,42230	0,47010	0,62250	0,139(9)
C106	0,2947(7)	0,3440(8)	0,2734(7)	0,030(4)
C107	0,8305(10)	0,4029(9)	0,9692(7)	0,047(6)
C108	0,5711(7)	0,4237(8)	0,7101(6)	0,029(4)
C109	0,7737(8)	0,3218(8)	0,6293(7)	0,033(4)
C110	0,8988(8)	0,1110(9)	0,9649(6)	0,036(4)
C111	0,6907(8)	0,1459(9)	0,6257(8)	0,042(5)
H11A	0,72670	0,16160	0,64840	0,139(9)
H11B	0,69760	0,14860	0,58720	0,139(9)
H11C	0,68150	0,09700	0,63490	0,139(9)
C112	1,0011(8)	0,4296(8)	1,1617(6)	0,039(4)
H11D	1,01870	0,42400	1,19950	0,139(9)
H11E	0,97370	0,47010	1,15920	0,139(9)
H11F	1,03290	0,43770	1,13820	0,139(9)
C113	0,5386(8)	0,3395(8)	0,5536(7)	0,032(4)
C114	0,7127(9)	0,1588(12)	0,9635(8)	0,055(6)
H11G	0,71360	0,16500	0,92420	0,139(9)
H11H	0,67510	0,17790	0,97430	0,139(9)
H11I	0,71540	0,10820	0,97250	0,139(9)
C115	0,7339(10)	0,3717(10)	0,5901(8)	0,050(5)
H11J	0,70540	0,39670	0,61070	0,139(9)
H11K	0,71200	0,34340	0,56130	0,139(9)
H11L	0,75940	0,40610	0,57390	0,139(9)
C116	0,2101(10)	0,3262(14)	0,4559(9)	0,075(8)
H11M	0,20510	0,29930	0,42170	0,139(9)
H11N	0,21120	0,37690	0,44770	0,139(9)
H11O	0,17650	0,31630	0,47700	0,139(9)
C117	0,5326(8)	0,3226(10)	0,0584(7)	0,037(4)
C118	0,7650(7)	0,1499(8)	0,7925(7)	0,030(4)
C119	0,6115(8)	0,4977(8)	0,1991(7)	0,040(4)
H11P	0,57240	0,48670	0,17950	0,139(9)
H11Q	0,63660	0,52100	0,17430	0,139(9)
H11R	0,60630	0,52940	0,22970	0,139(9)
C120	0,7656(8)	0,1980(8)	0,9941(7)	0,030(4)
C121	0,5911(8)	0,4936(8)	0,7370(7)	0,046(4)
H12A	0,63100	0,48800	0,75670	0,139(9)
H12B	0,56270	0,50760	0,76260	0,139(9)
H12C	0,59230	0,53020	0,70900	0,139(9)
C122	0,3533(11)	0,0114(9)	0,5020(7)	0,065(6)
H12D	0,36610	0,00170	0,54050	0,139(9)
H12E	0,37900	-0,01480	0,47930	0,139(9)
H12F	0,31170	-0,00380	0,49320	0,139(9)
C123	0,5410(10)	0,3280(14)	-0,0017(7)	0,069(7)
H12G	0,51260	0,29650	-0,02270	0,139(9)
H12H	0,58200	0,31400	-0,00720	0,139(9)
H12I	0,53400	0,37690	-0,01400	0,139(9)
C124	0,5868(8)	0,1783(8)	0,7751(7)	0,036(5)
C125	0,3801(12)	0,4695(9)	0,4294(8)	0,068(7)
H12J	0,36640	0,47780	0,39090	0,139(9)
H12K	0,42170	0,48550	0,43700	0,139(9)
H12L	0,35480	0,49600	0,45220	0,139(9)

C126	0,5756(9)	0,1174(9)	0,8155(8)	0,046(5)
H12M	0,54200	0,08820	0,79990	0,139(9)
H12N	0,56610	0,13770	0,85010	0,139(9)
H12O	0,61160	0,08800	0,82190	0,139(9)
C127	0,9050(15)	0,0338(10)	0,9614(8)	0,106(12)
H12P	0,90680	0,01320	0,99790	0,139(9)
H12Q	0,94170	0,02240	0,94520	0,139(9)
H12R	0,87050	0,01430	0,93860	0,139(9)
C128	0,5380(11)	0,3679(14)	0,4946(8)	0,083(9)
H12S	0,50060	0,35390	0,47320	0,139(9)
H12T	0,57200	0,34800	0,47790	0,139(9)
H12U	0,54110	0,41960	0,49530	0,139(9)
C129	0,8137(18)	0,4825(11)	0,9724(9)	0,145(16)
H12V	0,81320	0,50400	0,93620	0,139(9)
H12W	0,84320	0,50670	0,99790	0,139(9)
H12\$	0,77390	0,48690	0,98500	0,139(9)
C130	0,6725(8)	0,1221(8)	0,1223(7)	0,037(4)
H13A	0,64270	0,11640	0,09060	0,139(9)
H13B	0,67620	0,07770	0,14290	0,139(9)
H13C	0,71130	0,13430	0,11000	0,139(9)

Tabelle 52. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Nd}(\text{OAc})_3$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Nd1	0,0207(4)	0,0287(5)	0,0156(4)	-0,0017(3)	0,0040(3)	-0,0035(4)
Nd2	0,0186(4)	0,0291(4)	0,0172(4)	0,0013(3)	0,0019(3)	-0,0026(4)
Nd3	0,0210(4)	0,0297(4)	0,0139(4)	0,0014(3)	0,0026(3)	0,0012(4)
Nd4	0,0233(4)	0,0296(5)	0,0154(4)	0,0024(3)	0,0026(3)	0,0048(4)
Nd5	0,0201(4)	0,0260(4)	0,0146(4)	-0,0016(3)	0,0015(3)	-0,0017(4)
Nd6	0,0196(5)	0,0281(5)	0,0178(4)	-0,0022(3)	0,0031(4)	0,0012(4)
Nd7	0,0224(4)	0,0314(5)	0,0130(4)	0,0020(3)	0,0025(3)	0,0012(4)
Nd8	0,0181(4)	0,0302(5)	0,0176(4)	0,0002(3)	0,0026(3)	0,0016(4)
Nd9	0,0212(4)	0,0271(4)	0,0145(4)	-0,0014(3)	0,0024(4)	-0,0033(4)
Nd10	0,0206(4)	0,0305(5)	0,0175(4)	-0,0016(3)	0,0017(3)	-0,0042(4)
O11	0,026(6)	0,029(6)	0,006(4)	0,002(4)	0,006(4)	-0,006(5)
O12	0,006(5)	0,048(7)	0,012(5)	0,003(4)	-0,002(4)	0,003(4)
O13	0,013(5)	0,038(6)	0,022(5)	0,004(4)	0,002(4)	0,015(5)
O14	0,013(5)	0,060(8)	0,014(5)	0,002(5)	-0,001(4)	-0,016(5)
O15	0,017(6)	0,042(6)	0,012(5)	-0,007(4)	0,001(4)	-0,009(5)
O16	0,021(6)	0,051(7)	0,024(6)	0,002(5)	0,000(5)	-0,014(5)
O17	0,024(6)	0,024(6)	0,027(6)	0,009(4)	-0,003(5)	0,007(5)
O18	0,044(7)	0,010(5)	0,019(5)	-0,009(4)	0,004(5)	-0,009(5)
O19	0,021(6)	0,047(7)	0,026(6)	0,010(5)	0,006(5)	0,005(5)
O20	0,025(5)	0,019(5)	0,015(4)	0,004(4)	0,001(4)	0,003(4)
O21	0,018(6)	0,025(5)	0,028(6)	-0,010(4)	-0,006(5)	0,002(5)
O22	0,021(5)	0,048(7)	0,006(4)	-0,005(4)	0,005(4)	0,012(5)
O23	0,020(5)	0,048(7)	0,039(6)	-0,017(5)	0,004(5)	-0,015(6)
O24	0,050(7)	0,008(5)	0,021(5)	0,006(4)	0,009(5)	0,010(5)
O25	0,017(6)	0,040(6)	0,028(6)	-0,009(5)	0,003(5)	0,006(5)
O26	0,028(6)	0,048(7)	0,021(5)	0,010(5)	0,011(5)	-0,014(5)
O27	0,034(7)	0,032(6)	0,016(5)	-0,008(4)	-0,002(5)	-0,003(5)

O28	0,032(6)	0,061(8)	0,011(5)	0,010(5)	0,015(5)	0,007(5)
O29	0,023(5)	0,034(6)	0,014(5)	0,003(4)	0,004(4)	-0,008(5)
O30	0,017(6)	0,054(8)	0,026(6)	0,017(5)	0,002(5)	-0,008(5)
O31	0,021(5)	0,043(6)	0,011(4)	-0,010(4)	0,007(4)	0,006(5)
O32	0,040(7)	0,027(6)	0,022(5)	-0,008(5)	-0,001(5)	-0,006(5)
O33	0,017(5)	0,053(7)	0,020(5)	0,003(5)	-0,004(4)	-0,014(5)
O34	0,036(7)	0,037(6)	0,022(6)	0,006(4)	-0,008(5)	0,003(5)
O35	0,060(8)	0,000(4)	0,032(6)	-0,015(4)	0,011(6)	-0,007(5)
O36	0,024(6)	0,046(7)	0,033(6)	-0,023(5)	0,008(5)	-0,005(5)
O37	0,018(5)	0,033(6)	0,026(5)	0,009(5)	0,001(5)	0,005(5)
O38	0,040(7)	0,035(6)	0,020(6)	0,007(5)	-0,004(5)	-0,015(5)
O39	0,006(5)	0,039(6)	0,028(5)	-0,009(5)	-0,016(4)	0,001(4)
O40	0,044(7)	0,027(6)	0,019(5)	-0,001(4)	0,006(5)	0,003(5)
O41	0,014(5)	0,065(8)	0,019(5)	0,001(5)	0,001(4)	-0,010(5)
O42	0,032(6)	0,031(6)	0,020(6)	-0,008(4)	-0,006(5)	-0,002(5)
O43	0,018(6)	0,032(6)	0,026(5)	0,002(4)	0,007(5)	0,016(5)
O44	0,029(6)	0,087(9)	0,008(5)	0,001(5)	-0,003(5)	-0,024(6)
O45	0,042(7)	0,055(7)	0,019(6)	0,005(5)	0,012(6)	0,019(6)
O46	0,015(5)	0,035(6)	0,021(5)	0,005(4)	0,008(4)	0,005(5)
O47	0,033(7)	0,062(8)	0,014(5)	-0,009(5)	0,002(5)	0,016(6)
O48	0,030(6)	0,025(5)	0,018(5)	0,010(4)	0,003(5)	0,010(5)
O49	0,044(7)	0,035(6)	0,023(6)	0,007(5)	-0,001(5)	0,006(5)
O50	0,025(6)	0,042(7)	0,030(6)	0,003(5)	0,004(5)	0,007(5)
O51	0,039(7)	0,035(6)	0,011(5)	-0,001(4)	-0,004(5)	-0,005(5)
O52	0,032(7)	0,025(6)	0,042(6)	0,000(5)	-0,011(6)	-0,007(5)
O53	0,029(7)	0,058(8)	0,034(7)	0,018(5)	-0,002(6)	0,005(6)
O54	0,043(7)	0,031(6)	0,022(6)	-0,001(5)	0,006(5)	0,001(5)
O55	0,048(7)	0,025(6)	0,040(7)	0,001(5)	0,018(6)	0,006(5)
O56	0,027(6)	0,039(7)	0,042(7)	0,004(5)	-0,001(6)	-0,003(5)
O57	0,033(7)	0,035(6)	0,019(6)	-0,015(5)	-0,010(5)	0,006(5)
O58	0,019(5)	0,063(7)	0,013(5)	0,004(5)	0,000(4)	-0,008(5)
O59	0,050(7)	0,008(5)	0,013(5)	-0,006(4)	0,003(5)	-0,004(5)
O60	0,040(8)	0,058(8)	0,010(5)	0,001(5)	0,001(5)	-0,012(6)
O61	0,015(5)	0,028(6)	0,030(5)	0,005(4)	0,012(5)	-0,001(4)
O62	0,032(7)	0,031(6)	0,032(6)	0,003(4)	0,006(5)	-0,003(5)
O63	0,040(7)	0,025(6)	0,035(6)	-0,012(4)	0,014(6)	-0,006(5)
O64	0,029(6)	0,026(6)	0,035(6)	0,003(5)	0,009(5)	0,013(5)
O65	0,026(6)	0,041(7)	0,032(6)	0,013(5)	0,006(5)	0,012(5)
O66	0,018(5)	0,057(7)	0,017(5)	-0,005(5)	0,005(4)	0,017(5)
O67	0,057(8)	0,025(6)	0,038(7)	-0,002(5)	0,016(6)	-0,003(5)
O68	0,038(7)	0,078(9)	0,024(6)	-0,013(6)	0,000(6)	0,006(6)
O69	0,042(7)	0,053(8)	0,032(6)	-0,002(5)	0,015(6)	0,011(6)
C70	0,041(11)	0,032(9)	0,028(9)	0,006(7)	0,030(9)	0,001(8)
C71	0,015(8)	0,022(8)	0,022(7)	0,004(6)	0,002(6)	0,008(6)
O72	0,034(7)	0,032(6)	0,040(7)	0,000(5)	0,015(6)	-0,008(5)
C73	0,027(10)	0,042(10)	0,033(9)	-0,022(8)	0,017(8)	0,004(8)
C74	0,035(10)	0,024(8)	0,037(9)	-0,002(7)	0,009(8)	-0,012(7)
C75	0,041(11)	0,031(9)	0,010(8)	0,008(6)	0,004(7)	0,010(8)
C76	0,025(9)	0,052(11)	0,000(6)	0,001(6)	-0,003(6)	-0,001(8)
C77	0,078(15)	0,018(8)	0,018(8)	0,009(6)	0,015(9)	0,011(9)
C78	0,028(9)	0,038(10)	0,009(7)	-0,007(6)	0,005(7)	-0,017(8)
C79	0,025(9)	0,026(8)	0,028(8)	0,002(6)	0,011(8)	-0,010(7)
C80	0,056(12)	0,032(9)	0,018(8)	-0,001(7)	0,013(9)	-0,009(9)
C81	0,028(10)	0,052(11)	0,040(10)	-0,009(8)	0,009(8)	-0,028(8)

C82	0,083(14)	0,011(8)	0,034(9)	0,002(6)	0,007(10)	-0,003(8)
C83	0,046(11)	0,033(9)	0,019(8)	0,013(7)	0,004(8)	-0,003(8)
C84	0,041(11)	0,029(9)	0,042(11)	-0,015(7)	0,016(9)	-0,006(8)
C85	0,053(12)	0,061(12)	0,017(8)	-0,023(8)	-0,006(8)	0,027(10)
C86	0,020(9)	0,019(8)	0,038(10)	0,012(7)	0,019(8)	-0,001(6)
C87	0,035(11)	0,030(9)	0,036(10)	-0,005(7)	-0,004(8)	-0,002(7)
C88	0,051(14)	0,15(2)	0,012(9)	-0,010(11)	0,002(9)	0,049(14)
C89	0,056(12)	0,041(11)	0,030(10)	0,005(7)	0,010(9)	-0,023(9)
C90	0,058(12)	0,017(8)	0,024(8)	-0,007(6)	-0,003(8)	-0,008(8)
C91	0,027(10)	0,037(10)	0,032(10)	0,005(7)	0,011(8)	-0,004(8)
C92	0,031(10)	0,033(9)	0,051(11)	0,001(8)	0,023(9)	0,001(8)
C93	0,084(17)	0,087(16)	0,034(11)	0,011(10)	-0,014(11)	-0,070(14)
C94	0,021(9)	0,061(12)	0,019(8)	0,012(8)	-0,002(7)	-0,010(8)
C95	0,032(12)	0,15(2)	0,042(13)	-0,004(13)	-0,006(10)	0,058(14)
C96	0,037(10)	0,032(9)	0,033(10)	0,014(7)	0,002(8)	0,005(8)
C97	0,030(9)	0,022(8)	0,030(8)	0,004(6)	0,002(8)	-0,008(7)
C98	0,023(8)	0,034(9)	0,020(8)	-0,007(6)	0,003(7)	-0,011(7)
C99	0,018(8)	0,028(9)	0,025(8)	0,001(6)	-0,001(7)	-0,006(7)
C100	0,041(11)	0,026(9)	0,052(11)	-0,002(7)	0,015(9)	-0,012(8)
C101	0,013(8)	0,080(13)	0,019(8)	0,004(8)	-0,008(7)	0,005(8)
C102	0,047(11)	0,025(9)	0,048(11)	0,002(8)	0,018(10)	-0,001(8)
C103	0,050(13)	0,084(15)	0,021(9)	-0,030(9)	0,015(9)	-0,026(11)
C104	0,036(10)	0,054(11)	0,012(7)	0,006(7)	-0,005(7)	-0,009(9)
C105	0,050(11)	0,026(9)	0,054(12)	0,015(8)	0,011(10)	-0,001(8)
C106	0,015(8)	0,035(10)	0,040(10)	0,027(7)	-0,003(8)	-0,011(7)
C107	0,088(16)	0,022(9)	0,034(10)	0,019(7)	0,021(11)	0,016(9)
C108	0,023(9)	0,047(10)	0,020(8)	0,002(7)	0,012(7)	-0,003(8)
C109	0,038(11)	0,018(8)	0,044(11)	0,004(7)	0,004(9)	-0,008(7)
C110	0,052(12)	0,043(11)	0,012(8)	-0,001(7)	0,000(8)	0,000(9)
C111	0,041(11)	0,038(10)	0,051(11)	-0,015(8)	0,028(9)	-0,011(8)
C112	0,058(12)	0,030(9)	0,028(9)	-0,008(7)	-0,007(9)	0,000(8)
C113	0,042(11)	0,027(9)	0,027(9)	0,006(7)	0,011(9)	-0,002(8)
C114	0,046(13)	0,083(15)	0,030(10)	0,027(9)	-0,015(9)	-0,045(11)
C115	0,051(13)	0,051(12)	0,047(12)	0,012(9)	-0,002(10)	0,009(10)
C116	0,054(14)	0,12(2)	0,050(13)	-0,018(12)	-0,005(11)	0,070(14)
C117	0,035(10)	0,061(12)	0,018(9)	0,000(8)	0,016(8)	0,004(9)
C118	0,019(9)	0,039(10)	0,036(10)	-0,018(8)	0,011(8)	0,009(7)
C119	0,047(10)	0,023(9)	0,048(10)	-0,015(7)	-0,009(9)	-0,013(8)
C120	0,028(9)	0,028(9)	0,034(9)	-0,007(7)	-0,002(8)	-0,010(7)
C121	0,046(11)	0,034(10)	0,052(11)	-0,015(8)	-0,018(9)	0,009(9)
C122	0,121(19)	0,031(10)	0,037(11)	0,022(8)	-0,024(12)	-0,009(11)
C123	0,047(12)	0,14(2)	0,021(9)	0,005(11)	0,015(9)	-0,036(13)
C124	0,037(11)	0,030(9)	0,048(11)	0,019(8)	0,037(10)	0,014(8)
C125	0,13(2)	0,022(10)	0,049(12)	-0,014(8)	-0,011(13)	0,003(11)
C126	0,041(11)	0,048(11)	0,051(11)	0,010(9)	0,015(10)	-0,012(9)
C127	0,27(4)	0,029(12)	0,028(11)	-0,005(8)	0,045(17)	0,040(16)
C128	0,087(18)	0,14(2)	0,026(11)	0,039(12)	0,017(12)	-0,050(16)
C129	0,35(5)	0,055(14)	0,044(13)	0,015(11)	0,07(2)	0,07(2)
C130	0,050(11)	0,029(9)	0,035(9)	0,006(7)	0,024(9)	0,014(8)

Tabelle 53. Atomabstände/Å von Nd(OAc)₃.

Atom1	Atom2	Abstand	Atom1	Atom2	Abstand
Nd1	O40	2,446(9)	O11	C71	1,296(15)
Nd1	O15	2,471(9)	O12	C109	1,292(18)
Nd1	O61	2,505(8)	O13	C77	1,286(18)
Nd1	O41	2,523(10)	O14	C113	1,292(18)
Nd1	O28	2,532(11)	O15	C87	1,294(19)
Nd1	O18	2,538(9)	O15	Nd7	2,528(9)
Nd1	O55	2,556(9)	O16	C113	1,24(2)
Nd1	O11	2,557(10)	O17	C97	1,251(17)
Nd1	O59	2,559(9)	O18	C76	1,311(18)
Nd1	O39	2,899(9)	O18	Nd7	2,582(8)
Nd1	C87	2,916(18)	O19	C104	1,306(16)
Nd1	C98	2,942(15)	O19	Nd10	2,505(9)
Nd2	O69	2,366(10)	O20	C73	1,255(19)
Nd2	O17	2,410(10)	O21	C108	1,296(17)
Nd2	O11	2,461(8)	O22	C75	1,255(17)
Nd2	O61	2,462(9)	O23	C124	1,29(2)
Nd2	O60	2,477(10)	O24	C78	1,273(17)
Nd2	O62	2,483(10)	O25	C83	1,22(2)
Nd2	O33	2,510(10)	O26	C84	1,298(18)
Nd2	O20	2,510(9)	O27	C107	1,278(19)
Nd2	C117	2,843(15)	O28	C87	1,310(18)
Nd2	C76	3,077(16)	O28	Nd1	2,532(11)
Nd2	Nd8	4,0662(14)	O29	C120	1,308(17)
Nd3	O29	2,372(8)	O30	C83	1,317(19)
Nd3	O49	2,425(10)	O30	Nd8	2,479(11)
Nd3	O27	2,431(9)	O31	C70	1,289(18)
Nd3	O42	2,484(10)	O32	C96	1,29(2)
Nd3	O46	2,529(8)	O33	C117	1,311(19)
Nd3	O44	2,549(11)	O33	Nd7	2,531(10)
Nd3	O66	2,562(10)	O34	C110	1,283(18)
Nd3	O24	2,589(9)	O35	C94	1,236(19)
Nd3	O26	2,617(11)	O35	Nd4	2,606(10)
Nd3	C84	2,947(19)	O36	C70	1,242(19)
Nd3	Nd7	4,0305(10)	O37	C118	1,300(19)
Nd4	O72	2,454(10)	O38	C91	1,264(19)
Nd4	O67	2,472(10)	O39	C106	1,296(16)
Nd4	O46	2,478(9)	O39	Nd5	2,666(9)
Nd4	O19	2,505(10)	O39	Nd1	2,899(9)
Nd4	O37	2,513(9)	O40	C106	1,261(16)
Nd4	O12	2,516(9)	O41	C71	1,291(16)
Nd4	O24	2,517(9)	O42	C118	1,228(19)
Nd4	O43	2,539(10)	O43	C109	1,243(18)
Nd4	O35	2,606(10)	O43	Nd9	2,548(9)
Nd4	C104	2,864(17)	O44	C84	1,252(19)
Nd4	C94	2,898(16)	O45	C75	1,198(19)
Nd4	C109	2,922(18)	O46	C104	1,227(18)
Nd5	O51	2,409(10)	O47	C77	1,21(2)
Nd5	O54	2,410(10)	O48	C107	1,246(17)
Nd5	O59	2,414(8)	O49	C110	1,288(18)
Nd5	O30	2,433(11)	O50	C86	1,262(19)
Nd5	O13	2,452(8)	O51	C96	1,279(18)

Nd5	O41	2,527(9)	O52	C97	1,252(18)
Nd5	O22	2,535(10)	O53	C124	1,26(2)
Nd5	O45	2,547(11)	O54	C91	1,287(19)
Nd5	O39	2,666(9)	O55	C98	1,246(16)
Nd5	C75	2,866(17)	O56	C108	1,248(18)
Nd5	Nd9	3,9765(10)	O57	C80	1,24(2)
Nd6	O23	2,366(10)	O58	C120	1,248(18)
Nd6	O21	2,412(10)	O59	C98	1,276(16)
Nd6	O57	2,454(9)	O60	C117	1,22(2)
Nd6	O12	2,457(8)	O61	C86	1,279(16)
Nd6	O37	2,459(9)	O62	C76	1,235(18)
Nd6	O31	2,474(9)	O63	C78	1,293(18)
Nd6	O63	2,504(10)	O64	C99	1,293(17)
Nd6	O66	2,513(10)	O65	C73	1,292(19)
Nd6	C80	2,852(15)	O66	C80	1,295(19)
Nd6	Nd10	4,0309(13)	O67	C94	1,278(16)
Nd7	O26	2,373(9)	O67	Nd4	2,472(10)
Nd7	O48	2,382(9)	O68	C79	1,245(18)
Nd7	O34	2,402(10)	O69	C79	1,296(19)
Nd7	O50	2,483(11)	C70	C111	1,55(2)
Nd7	O15	2,528(9)	C71	C81	1,44(2)
Nd7	O33	2,531(10)	O72	C99	1,239(16)
Nd7	O58	2,550(10)	C73	C89	1,49(2)
Nd7	O18	2,582(9)	C74	C78	1,48(2)
Nd7	O29	2,595(10)	C75	C95	1,59(3)
Nd7	C120	2,986(17)	C76	C102	1,49(2)
Nd8	O68	2,350(11)	C77	C116	1,54(3)
Nd8	O65	2,476(10)	C79	C130	1,55(2)
Nd8	O30	2,479(11)	C80	C88	1,53(2)
Nd8	O17	2,500(10)	C82	C98	1,50(2)
Nd8	O28	2,506(8)	C83	O30	1,317(19)
Nd8	O25	2,522(9)	C83	C85	1,46(2)
Nd8	O39	2,527(9)	C84	C93	1,52(3)
Nd8	O52	2,545(10)	C86	O61	1,279(16)
Nd8	O20	2,552(9)	C86	C112	1,46(2)
Nd8	C83	2,882(16)	C87	O28	1,310(18)
Nd8	C97	2,908(15)	C87	C103	1,46(2)
Nd8	C73	2,917(16)	C90	C118	1,48(2)
Nd9	O32	2,406(9)	C91	C125	1,50(2)
Nd9	O38	2,417(10)	C92	C106	1,48(2)
Nd9	O35	2,430(9)	C94	C105	1,52(2)
Nd9	O14	2,436(10)	C94	Nd4	2,898(16)
Nd9	O22	2,468(8)	C96	C122	1,52(2)
Nd9	O13	2,541(10)	C97	C119	1,51(2)
Nd9	O47	2,545(11)	C99	O64	1,293(16)
Nd9	O43	2,548(9)	C99	C100	1,507(19)
Nd9	O64	2,656(10)	C101	C104	1,55(2)
Nd9	C77	2,89(2)	C106	O39	1,296(16)
Nd10	O53	2,418(11)	C107	C129	1,52(2)
Nd10	O14	2,480(10)	C108	C121	1,49(2)
Nd10	O36	2,483(9)	C109	C115	1,53(2)
Nd10	O21	2,488(10)	C110	C127	1,44(2)
Nd10	O19	2,505(9)	C113	C128	1,52(2)
Nd10	O64	2,508(11)	C114	C120	1,50(2)

Nd10	O31	2,539(9)	C117	C123	1,49(2)
Nd10	O16	2,543(10)	C124	C126	1,53(2)
Nd10	O56	2,548(10)			
Nd10	C70	2,860(15)			
Nd10	C113	2,904(15)			
Nd10	C108	2,928(16)			

Tabelle 54. Winkel/° von Nd(OAc)₃.

Atom1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O40	Nd1	O15	105,7(3)	O30	Nd8	O25	52,1(4)
O40	Nd1	O61	134,4(3)	O17	Nd8	O25	80,7(3)
O15	Nd1	O61	79,3(3)	O28	Nd8	O25	141,1(4)
O40	Nd1	O41	74,8(3)	O68	Nd8	O39	76,5(4)
O15	Nd1	O41	177,1(3)	O65	Nd8	O39	78,2(3)
O61	Nd1	O41	102,5(3)	O30	Nd8	O39	66,7(3)
O40	Nd1	O28	87,6(4)	O17	Nd8	O39	161,7(3)
O15	Nd1	O28	52,8(3)	O28	Nd8	O39	72,8(3)
O61	Nd1	O28	125,4(3)	O25	Nd8	O39	116,3(3)
O41	Nd1	O28	124,5(3)	O68	Nd8	O52	127,4(4)
O40	Nd1	O18	71,7(3)	O65	Nd8	O52	145,0(3)
O15	Nd1	O18	66,0(3)	O30	Nd8	O52	87,7(4)
O61	Nd1	O18	69,4(3)	O17	Nd8	O52	50,8(3)
O41	Nd1	O18	116,7(3)	O28	Nd8	O52	73,4(3)
O28	Nd1	O18	105,9(3)	O25	Nd8	O52	71,4(3)
O40	Nd1	O55	155,0(3)	O39	Nd8	O52	125,6(3)
O15	Nd1	O55	81,4(4)	O68	Nd8	O20	72,0(3)
O61	Nd1	O55	70,1(3)	O65	Nd8	O20	51,4(3)
O41	Nd1	O55	97,0(4)	O30	Nd8	O20	116,8(3)
O28	Nd1	O55	77,7(4)	O17	Nd8	O20	64,4(3)
O18	Nd1	O55	131,6(3)	O28	Nd8	O20	132,2(3)
O40	Nd1	O11	74,7(3)	O25	Nd8	O20	76,5(3)
O15	Nd1	O11	132,0(3)	O39	Nd8	O20	123,9(3)
O61	Nd1	O11	69,9(3)	O52	Nd8	O20	110,4(3)
O41	Nd1	O11	50,9(3)	O68	Nd8	C83	154,3(4)
O28	Nd1	O11	162,3(3)	O65	Nd8	C83	75,6(4)
O18	Nd1	O11	69,1(3)	O30	Nd8	C83	27,1(4)
O55	Nd1	O11	118,7(3)	O17	Nd8	C83	103,0(4)
O40	Nd1	O59	105,8(3)	O28	Nd8	C83	129,6(4)
O15	Nd1	O59	113,6(3)	O25	Nd8	C83	25,0(4)
O61	Nd1	O59	113,5(3)	O39	Nd8	C83	92,6(4)
O41	Nd1	O59	63,6(3)	O52	Nd8	C83	77,9(4)
O28	Nd1	O59	72,1(3)	O20	Nd8	C83	96,3(4)
O18	Nd1	O59	177,0(3)	O68	Nd8	C97	111,8(4)
O55	Nd1	O59	50,5(3)	O65	Nd8	C97	132,5(4)
O11	Nd1	O59	112,1(3)	O30	Nd8	C97	107,5(4)
O40	Nd1	O39	47,5(3)	O17	Nd8	C97	25,3(4)
O15	Nd1	O39	115,0(3)	O28	Nd8	C97	81,6(4)
O61	Nd1	O39	165,4(3)	O25	Nd8	C97	73,7(4)
O41	Nd1	O39	63,1(3)	O39	Nd8	C97	148,5(4)
O28	Nd1	O39	66,3(3)	O52	Nd8	C97	25,4(4)

O18	Nd1	O39	118,1(3)	O20	Nd8	C97	86,9(4)
O55	Nd1	O39	107,6(3)	C83	Nd8	C97	89,7(4)
O11	Nd1	O39	100,3(3)	O68	Nd8	C73	72,1(4)
O59	Nd1	O39	59,2(3)	O65	Nd8	C73	26,1(4)
O40	Nd1	C87	97,1(4)	O30	Nd8	C73	99,7(4)
O15	Nd1	C87	26,2(4)	O17	Nd8	C73	89,6(4)
O61	Nd1	C87	102,6(4)	O28	Nd8	C73	141,9(4)
O41	Nd1	C87	151,1(4)	O25	Nd8	C73	76,0(3)
O28	Nd1	C87	26,6(4)	O39	Nd8	C73	100,7(4)
O18	Nd1	C87	85,4(4)	O52	Nd8	C73	131,5(4)
O55	Nd1	C87	78,6(4)	O20	Nd8	C73	25,4(4)
O11	Nd1	C87	154,5(4)	C83	Nd8	C73	87,5(4)
O59	Nd1	C87	93,3(4)	C97	Nd8	C73	110,7(5)
O39	Nd1	C87	90,8(4)	O32	Nd9	O38	138,4(4)
O40	Nd1	C98	131,2(3)	O32	Nd9	O35	129,4(3)
O15	Nd1	C98	98,5(4)	O38	Nd9	O35	92,1(3)
O61	Nd1	C98	91,1(3)	O32	Nd9	O14	114,9(4)
O41	Nd1	C98	79,3(4)	O38	Nd9	O14	75,6(4)
O28	Nd1	C98	74,2(4)	O35	Nd9	O14	72,1(4)
O18	Nd1	C98	156,5(3)	O32	Nd9	O22	71,4(4)
O55	Nd1	C98	24,9(3)	O38	Nd9	O22	72,5(3)
O11	Nd1	C98	117,4(4)	O35	Nd9	O22	147,9(4)
O59	Nd1	C98	25,6(3)	O14	Nd9	O22	76,8(3)
O39	Nd1	C98	84,0(3)	O32	Nd9	O13	76,6(4)
C87	Nd1	C98	86,4(4)	O38	Nd9	O13	74,3(3)
O69	Nd2	O17	87,7(4)	O35	Nd9	O13	129,4(3)
O69	Nd2	O11	139,7(3)	O14	Nd9	O13	143,2(3)
O17	Nd2	O11	98,4(3)	O22	Nd9	O13	74,4(3)
O69	Nd2	O61	82,4(4)	O32	Nd9	O47	113,5(4)
O17	Nd2	O61	149,4(3)	O38	Nd9	O47	68,0(4)
O11	Nd2	O61	72,1(3)	O35	Nd9	O47	78,5(4)
O69	Nd2	O60	76,4(4)	O14	Nd9	O47	131,7(4)
O17	Nd2	O60	75,3(4)	O22	Nd9	O47	118,6(3)
O11	Nd2	O60	143,8(4)	O13	Nd9	O47	51,0(3)
O61	Nd2	O60	129,3(4)	O32	Nd9	O43	73,0(4)
O69	Nd2	O62	149,2(3)	O38	Nd9	O43	134,5(4)
O17	Nd2	O62	93,2(3)	O35	Nd9	O43	66,5(3)
O11	Nd2	O62	70,6(3)	O14	Nd9	O43	127,8(3)
O61	Nd2	O62	109,9(3)	O22	Nd9	O43	143,2(3)
O60	Nd2	O62	74,2(4)	O13	Nd9	O43	88,7(3)
O69	Nd2	O33	76,1(4)	O47	Nd9	O43	68,5(3)
O17	Nd2	O33	127,8(3)	O32	Nd9	O64	73,8(4)
O11	Nd2	O33	125,8(3)	O38	Nd9	O64	138,9(4)
O61	Nd2	O33	77,7(3)	O35	Nd9	O64	64,2(3)
O60	Nd2	O33	52,8(4)	O14	Nd9	O64	65,6(3)
O62	Nd2	O33	79,2(4)	O22	Nd9	O64	109,4(3)
O69	Nd2	O20	74,6(3)	O13	Nd9	O64	146,8(3)
O17	Nd2	O20	66,3(3)	O47	Nd9	O64	131,3(3)
O11	Nd2	O20	71,8(3)	O43	Nd9	O64	68,5(3)
O61	Nd2	O20	83,1(3)	O32	Nd9	C77	97,0(4)
O60	Nd2	O20	132,0(4)	O38	Nd9	C77	67,3(4)
O62	Nd2	O20	133,4(3)	O35	Nd9	C77	103,2(4)
O33	Nd2	O20	146,7(3)	O14	Nd9	C77	142,5(4)
O69	Nd2	C117	73,5(4)	O22	Nd9	C77	96,6(4)

O17	Nd2	C117	100,4(4)	O13	Nd9	C77	26,4(4)
O11	Nd2	C117	142,4(4)	O47	Nd9	C77	24,8(4)
O61	Nd2	C117	104,4(4)	O43	Nd9	C77	78,8(4)
O60	Nd2	C117	25,4(4)	O64	Nd9	C77	147,3(4)
O62	Nd2	C117	76,1(4)	O32	Nd9	Nd5	70,3(3)
O33	Nd2	C117	27,4(4)	O38	Nd9	Nd5	68,5(3)
O20	Nd2	C117	145,8(4)	O35	Nd9	Nd5	157,7(3)
O69	Nd2	C76	145,1(4)	O14	Nd9	Nd5	111,6(2)
O17	Nd2	C76	115,5(4)	O22	Nd9	Nd5	38,0(2)
O11	Nd2	C76	65,8(3)	O13	Nd9	Nd5	36,44(18)
O61	Nd2	C76	87,8(4)	O47	Nd9	Nd5	83,7(2)
O60	Nd2	C76	84,5(4)	O43	Nd9	Nd5	118,9(2)
O62	Nd2	C76	22,6(4)	O64	Nd9	Nd5	138,0(2)
O33	Nd2	C76	69,1(4)	C77	Nd9	Nd5	59,8(3)
O20	Nd2	C76	137,4(3)	O53	Nd10	O14	139,6(4)
C117	Nd2	C76	76,7(4)	O53	Nd10	O36	77,0(4)
O69	Nd2	Nd1	120,5(3)	O14	Nd10	O36	76,4(4)
O17	Nd2	Nd1	137,8(2)	O53	Nd10	O21	96,3(4)
O11	Nd2	Nd1	39,6(2)	O14	Nd10	O21	122,6(3)
O61	Nd2	Nd1	38,34(19)	O36	Nd10	O21	116,2(3)
O60	Nd2	Nd1	137,7(3)	O53	Nd10	O19	69,8(4)
O62	Nd2	Nd1	77,8(2)	O14	Nd10	O19	117,1(3)
O33	Nd2	Nd1	91,4(2)	O36	Nd10	O19	140,4(3)
O20	Nd2	Nd1	90,19(19)	O21	Nd10	O19	88,7(3)
C117	Nd2	Nd1	116,6(4)	O53	Nd10	O64	77,7(4)
C76	Nd2	Nd1	59,3(3)	O14	Nd10	O64	67,3(3)
O69	Nd2	Nd8	65,6(3)	O36	Nd10	O64	77,6(3)
O17	Nd2	Nd8	34,8(2)	O21	Nd10	O64	163,7(3)
O11	Nd2	Nd8	98,0(2)	O19	Nd10	O64	75,0(3)
O61	Nd2	Nd8	116,0(2)	O53	Nd10	O31	71,6(3)
O60	Nd2	Nd8	96,0(3)	O14	Nd10	O31	113,1(3)
O62	Nd2	Nd8	126,2(3)	O36	Nd10	O31	52,4(3)
O33	Nd2	Nd8	135,9(2)	O21	Nd10	O31	65,1(3)
O20	Nd2	Nd8	36,9(2)	O19	Nd10	O31	129,8(3)
C117	Nd2	Nd8	115,9(4)	O64	Nd10	O31	125,5(3)
C76	Nd2	Nd8	146,6(3)	O53	Nd10	O16	144,2(4)
Nd1	Nd2	Nd8	126,25(3)	O14	Nd10	O16	51,5(3)
O29	Nd3	O49	72,9(3)	O36	Nd10	O16	75,1(4)
O29	Nd3	O27	78,1(3)	O21	Nd10	O16	76,7(3)
O49	Nd3	O27	134,6(3)	O19	Nd10	O16	143,4(4)
O29	Nd3	O42	85,3(3)	O64	Nd10	O16	116,9(3)
O49	Nd3	O42	72,1(4)	O31	Nd10	O16	73,8(3)
O27	Nd3	O42	139,3(3)	O53	Nd10	O56	129,6(4)
O29	Nd3	O46	144,7(3)	O14	Nd10	O56	87,2(4)
O49	Nd3	O46	74,7(3)	O36	Nd10	O56	147,6(3)
O27	Nd3	O46	136,4(3)	O21	Nd10	O56	51,3(3)
O42	Nd3	O46	71,6(3)	O19	Nd10	O56	71,9(3)
O29	Nd3	O44	122,0(3)	O64	Nd10	O56	121,6(3)
O49	Nd3	O44	92,0(4)	O31	Nd10	O56	112,7(3)
O27	Nd3	O44	74,7(4)	O16	Nd10	O56	72,9(3)
O42	Nd3	O44	143,5(3)	O53	Nd10	C70	71,6(4)
O46	Nd3	O44	72,6(3)	O14	Nd10	C70	95,3(4)
O29	Nd3	O66	77,2(3)	O36	Nd10	C70	25,7(4)
O49	Nd3	O66	132,8(4)	O21	Nd10	C70	91,4(4)

O27	Nd3	O66	70,4(4)	O19	Nd10	C70	141,1(4)
O42	Nd3	O66	69,9(3)	O64	Nd10	C70	100,9(4)
O46	Nd3	O66	116,9(3)	O31	Nd10	C70	26,8(4)
O44	Nd3	O66	135,1(4)	O16	Nd10	C70	73,6(4)
O29	Nd3	O24	143,8(3)	O56	Nd10	C70	134,3(4)
O49	Nd3	O24	139,6(3)	O53	Nd10	C113	150,9(4)
O27	Nd3	O24	81,6(3)	O14	Nd10	C113	26,3(4)
O42	Nd3	O24	91,2(3)	O36	Nd10	C113	74,2(4)
O46	Nd3	O24	65,1(3)	O21	Nd10	C113	99,4(4)
O44	Nd3	O24	80,0(3)	O19	Nd10	C113	134,6(4)
O66	Nd3	O24	67,8(3)	O64	Nd10	C113	92,7(4)
O29	Nd3	O26	71,8(3)	O31	Nd10	C113	93,2(4)
O49	Nd3	O26	70,3(4)	O16	Nd10	C113	25,2(4)
O27	Nd3	O26	67,8(4)	O56	Nd10	C113	78,8(4)
O42	Nd3	O26	140,2(3)	C70	Nd10	C113	83,7(4)
O46	Nd3	O26	109,8(3)	O53	Nd10	C108	114,7(4)
O44	Nd3	O26	50,7(3)	O14	Nd10	C108	105,6(4)
O66	Nd3	O26	131,8(3)	O36	Nd10	C108	135,9(4)
O24	Nd3	O26	126,4(3)	O21	Nd10	C108	26,1(4)
O29	Nd3	C84	97,0(4)	O19	Nd10	C108	79,0(3)
O49	Nd3	C84	83,9(4)	O64	Nd10	C108	144,9(4)
O27	Nd3	C84	65,6(4)	O31	Nd10	C108	89,4(4)
O42	Nd3	C84	154,2(4)	O16	Nd10	C108	73,2(3)
O46	Nd3	C84	93,3(4)	O56	Nd10	C108	25,2(4)
O44	Nd3	C84	25,0(4)	C70	Nd10	C108	114,1(5)
O66	Nd3	C84	135,8(4)	C113	Nd10	C108	89,0(4)
O24	Nd3	C84	101,5(4)	C71	O11	Nd2	147,5(9)
O26	Nd3	C84	26,1(4)	C71	O11	Nd1	96,1(8)
O29	Nd3	Nd7	37,7(2)	Nd2	O11	Nd1	102,6(3)
O49	Nd3	Nd7	66,8(2)	C109	O12	Nd6	152,5(10)
O27	Nd3	Nd7	68,8(2)	C109	O12	Nd4	94,7(9)
O42	Nd3	Nd7	116,3(2)	Nd6	O12	Nd4	104,3(3)
O46	Nd3	Nd7	134,2(2)	C77	O13	Nd5	141,5(9)
O44	Nd3	Nd7	84,6(2)	C77	O13	Nd9	92,2(10)
O66	Nd3	Nd7	107,5(2)	Nd5	O13	Nd9	105,6(3)
O24	Nd3	Nd7	149,4(2)	C113	O14	Nd9	149,8(10)
O26	Nd3	Nd7	34,12(19)	C113	O14	Nd10	95,5(10)
C84	Nd3	Nd7	59,6(3)	Nd9	O14	Nd10	114,2(4)
O72	Nd4	O67	152,5(3)	C87	O15	Nd1	96,5(9)
O72	Nd4	O46	107,2(4)	C87	O15	Nd7	143,7(10)
O67	Nd4	O46	80,8(4)	Nd1	O15	Nd7	112,7(4)
O72	Nd4	O19	86,7(4)	C113	O16	Nd10	93,9(8)
O67	Nd4	O19	77,5(4)	C97	O17	Nd2	152,2(10)
O46	Nd4	O19	52,4(3)	C97	O17	Nd8	95,9(9)
O72	Nd4	O37	135,5(3)	Nd2	O17	Nd8	111,8(4)
O67	Nd4	O37	71,4(3)	C76	O18	Nd1	130,7(7)
O46	Nd4	O37	77,8(3)	C76	O18	Nd7	120,5(7)
O19	Nd4	O37	124,6(3)	Nd1	O18	Nd7	108,7(3)
O72	Nd4	O12	76,9(3)	C104	O19	Nd10	151,8(10)
O67	Nd4	O12	117,4(4)	C104	O19	Nd4	91,9(9)
O46	Nd4	O12	132,8(3)	Nd10	O19	Nd4	115,8(4)
O19	Nd4	O12	163,6(3)	C73	O20	Nd2	154,0(10)
O37	Nd4	O12	69,4(3)	C73	O20	Nd8	93,8(9)
O72	Nd4	O24	72,6(3)	Nd2	O20	Nd8	106,9(3)

O67	Nd4	O24	133,1(3)	C108	O21	Nd6	153,0(10)
O46	Nd4	O24	66,9(3)	C108	O21	Nd10	96,2(9)
O19	Nd4	O24	105,2(4)	Nd6	O21	Nd10	110,7(4)
O37	Nd4	O24	69,1(3)	C75	O22	Nd9	144,7(9)
O12	Nd4	O24	70,2(3)	C75	O22	Nd5	91,9(9)
O72	Nd4	O43	73,2(4)	Nd9	O22	Nd5	105,3(3)
O67	Nd4	O43	97,1(4)	C124	O23	Nd6	144,2(10)
O46	Nd4	O43	176,1(3)	C78	O24	Nd4	127,7(8)
O19	Nd4	O43	124,0(3)	C78	O24	Nd3	123,6(8)
O37	Nd4	O43	104,7(3)	Nd4	O24	Nd3	108,6(3)
O12	Nd4	O43	51,1(3)	C83	O25	Nd8	94,2(9)
O24	Nd4	O43	116,7(3)	C84	O26	Nd7	155,6(10)
O72	Nd4	O35	102,4(3)	C84	O26	Nd3	91,3(10)
O67	Nd4	O35	51,2(3)	Nd7	O26	Nd3	107,7(4)
O46	Nd4	O35	112,1(3)	C107	O27	Nd3	133,9(9)
O19	Nd4	O35	70,5(4)	C87	O28	Nd8	148,4(11)
O37	Nd4	O35	116,9(3)	C87	O28	Nd1	93,3(9)
O12	Nd4	O35	112,7(3)	Nd8	O28	Nd1	115,5(4)
O24	Nd4	O35	173,8(3)	C120	O29	Nd3	155,7(9)
O43	Nd4	O35	64,1(3)	C120	O29	Nd7	94,0(9)
O72	Nd4	C104	98,4(4)	Nd3	O29	Nd7	108,4(3)
O67	Nd4	C104	77,5(4)	C83	O30	Nd5	149,0(10)
O46	Nd4	C104	25,3(3)	C83	O30	Nd8	93,7(9)
O19	Nd4	C104	27,1(4)	Nd5	O30	Nd8	117,2(4)
O37	Nd4	C104	100,4(4)	C70	O31	Nd6	158,9(10)
O12	Nd4	C104	155,5(4)	C70	O31	Nd10	90,6(9)
O24	Nd4	C104	85,5(4)	Nd6	O31	Nd10	107,0(3)
O43	Nd4	C104	151,1(4)	C96	O32	Nd9	135,9(10)
O35	Nd4	C104	91,8(4)	C117	O33	Nd2	90,6(9)
O72	Nd4	C94	127,3(4)	C117	O33	Nd7	140,7(10)
O67	Nd4	C94	26,0(4)	Nd2	O33	Nd7	118,1(4)
O46	Nd4	C94	97,4(4)	C110	O34	Nd7	139,2(10)
O19	Nd4	C94	72,5(4)	C94	O35	Nd9	142,7(11)
O37	Nd4	C94	94,5(4)	C94	O35	Nd4	90,7(9)
O12	Nd4	C94	117,6(4)	Nd9	O35	Nd4	110,5(3)
O24	Nd4	C94	158,9(4)	C70	O36	Nd10	94,4(9)
O43	Nd4	C94	79,5(4)	C118	O37	Nd6	122,0(8)
O35	Nd4	C94	25,2(4)	C118	O37	Nd4	127,5(9)
C104	Nd4	C94	84,5(5)	Nd6	O37	Nd4	104,3(3)
O72	Nd4	C109	71,4(4)	C91	O38	Nd9	137,7(10)
O67	Nd4	C109	110,4(4)	C106	O39	Nd8	121,3(9)
O46	Nd4	C109	158,8(4)	C106	O39	Nd5	129,7(9)
O19	Nd4	C109	145,8(4)	Nd8	O39	Nd5	107,6(3)
O37	Nd4	C109	88,7(4)	C106	O39	Nd1	85,9(9)
O12	Nd4	C109	26,1(4)	Nd8	O39	Nd1	103,3(3)
O24	Nd4	C109	93,2(4)	Nd5	O39	Nd1	94,5(3)
O43	Nd4	C109	25,1(4)	C106	O40	Nd1	108,7(9)
O35	Nd4	C109	88,5(4)	C71	O41	Nd1	97,9(8)
C104	Nd4	C109	169,6(4)	C71	O41	Nd5	152,8(9)
C94	Nd4	C109	99,9(5)	Nd1	O41	Nd5	108,1(4)
O51	Nd5	O54	137,4(3)	C118	O42	Nd3	127,1(10)
O51	Nd5	O59	92,0(3)	C109	O43	Nd4	94,9(9)
O54	Nd5	O59	130,3(3)	C109	O43	Nd9	154,8(10)
O51	Nd5	O30	76,4(4)	Nd4	O43	Nd9	108,9(4)

O54	Nd5	O30	116,1(4)	C84	O44	Nd3	95,6(9)
O59	Nd5	O30	72,4(4)	C75	O45	Nd5	92,7(10)
O51	Nd5	O13	72,0(3)	C104	O46	Nd4	95,2(8)
O54	Nd5	O13	71,5(3)	C104	O46	Nd3	144,5(10)
O59	Nd5	O13	149,2(3)	Nd4	O46	Nd3	111,9(3)
O30	Nd5	O13	78,2(3)	C77	O47	Nd9	93,8(11)
O51	Nd5	O41	135,4(4)	C107	O48	Nd7	137,4(10)
O54	Nd5	O41	72,5(3)	C110	O49	Nd3	138,3(10)
O59	Nd5	O41	65,6(3)	C86	O50	Nd7	127,5(9)
O30	Nd5	O41	125,8(3)	C96	O51	Nd5	139,8(10)
O13	Nd5	O41	143,2(3)	C97	O52	Nd8	93,7(8)
O51	Nd5	O22	72,7(3)	C124	O53	Nd10	130,0(10)
O54	Nd5	O22	77,2(4)	C91	O54	Nd5	135,9(10)
O59	Nd5	O22	126,4(3)	C98	O55	Nd1	95,1(8)
O30	Nd5	O22	143,9(3)	C108	O56	Nd10	94,7(9)
O13	Nd5	O22	74,8(3)	C80	O57	Nd6	95,5(9)
O41	Nd5	O22	89,7(3)	C120	O58	Nd7	97,7(9)
O51	Nd5	O45	68,9(4)	C98	O59	Nd5	142,4(10)
O54	Nd5	O45	112,5(4)	C98	O59	Nd1	94,2(8)
O59	Nd5	O45	76,0(4)	Nd5	O59	Nd1	110,6(3)
O30	Nd5	O45	131,4(4)	C117	O60	Nd2	94,2(9)
O13	Nd5	O45	119,4(3)	C86	O61	Nd2	123,1(8)
O41	Nd5	O45	68,5(3)	C86	O61	Nd1	125,0(9)
O22	Nd5	O45	50,5(3)	Nd2	O61	Nd1	104,1(3)
O51	Nd5	O39	139,2(3)	C76	O62	Nd2	106,8(10)
O54	Nd5	O39	75,4(3)	C78	O63	Nd6	107,5(8)
O59	Nd5	O39	64,3(3)	C99	O64	Nd10	124,0(10)
O30	Nd5	O39	65,1(3)	C99	O64	Nd9	130,0(10)
O13	Nd5	O39	111,0(3)	Nd10	O64	Nd9	106,0(3)
O41	Nd5	O39	66,6(3)	C73	O65	Nd8	96,4(9)
O22	Nd5	O39	148,1(3)	C80	O66	Nd6	91,3(9)
O45	Nd5	O39	128,9(3)	C80	O66	Nd3	142,3(10)
O51	Nd5	C75	66,9(4)	Nd6	O66	Nd3	118,0(3)
O54	Nd5	C75	96,7(4)	C94	O67	Nd4	96,0(9)
O59	Nd5	C75	100,6(4)	C79	O68	Nd8	138,1(11)
O30	Nd5	C75	142,5(4)	C79	O69	Nd2	141,5(10)
O13	Nd5	C75	97,0(4)	O36	C70	O31	122,5(14)
O41	Nd5	C75	79,4(4)	O36	C70	C111	121,7(14)
O22	Nd5	C75	25,9(4)	O31	C70	C111	115,8(15)
O45	Nd5	C75	24,7(4)	O36	C70	Nd10	60,0(7)
O39	Nd5	C75	146,0(3)	O31	C70	Nd10	62,6(7)
O51	Nd5	Nd9	68,0(2)	C111	C70	Nd10	175,1(10)
O54	Nd5	Nd9	69,8(2)	O41	C71	O11	115,0(13)
O59	Nd5	Nd9	156,1(2)	O41	C71	C81	123,7(12)
O30	Nd5	Nd9	113,1(2)	O11	C71	C81	121,2(12)
O13	Nd5	Nd9	38,0(2)	O41	C71	Nd1	56,8(7)
O41	Nd5	Nd9	119,3(2)	O11	C71	Nd1	58,3(7)
O22	Nd5	Nd9	36,78(18)	C81	C71	Nd1	174,6(11)
O45	Nd5	Nd9	84,3(2)	C99	O72	Nd4	109,6(9)
O39	Nd5	Nd9	139,5(2)	O20	C73	O65	117,9(14)
C75	Nd5	Nd9	60,3(3)	O20	C73	C89	123,3(16)
O51	Nd5	Nd1	126,8(2)	O65	C73	C89	118,7(16)
O54	Nd5	Nd1	94,7(2)	O20	C73	Nd8	60,8(8)
O59	Nd5	Nd1	35,9(2)	O65	C73	Nd8	57,5(8)

O30	Nd5	Nd1	90,9(2)	C89	C73	Nd8	169,8(11)
O13	Nd5	Nd1	155,8(2)	O45	C75	O22	124,3(16)
O41	Nd5	Nd1	35,9(2)	O45	C75	C95	119,5(15)
O22	Nd5	Nd1	122,66(19)	O22	C75	C95	116,2(15)
O45	Nd5	Nd1	84,1(2)	O45	C75	Nd5	62,6(9)
O39	Nd5	Nd1	45,0(2)	O22	C75	Nd5	62,1(8)
C75	Nd5	Nd1	104,5(3)	C95	C75	Nd5	174,1(12)
Nd9	Nd5	Nd1	155,21(2)	O62	C76	O18	123,5(14)
O23	Nd6	O21	84,5(4)	O62	C76	C102	121,1(15)
O23	Nd6	O57	77,5(3)	O18	C76	C102	115,4(14)
O21	Nd6	O57	75,1(3)	O62	C76	Nd2	50,6(8)
O23	Nd6	O12	140,1(3)	O18	C76	Nd2	73,0(8)
O21	Nd6	O12	101,5(3)	C102	C76	Nd2	171,6(11)
O57	Nd6	O12	142,3(4)	O47	C77	O13	122,5(18)
O23	Nd6	O37	83,2(3)	O47	C77	C116	121,6(15)
O21	Nd6	O37	148,6(3)	O13	C77	C116	115,8(15)
O57	Nd6	O37	129,5(3)	O47	C77	Nd9	61,5(10)
O12	Nd6	O37	71,2(3)	O13	C77	Nd9	61,4(9)
O23	Nd6	O31	74,0(3)	C116	C77	Nd9	175,9(12)
O21	Nd6	O31	67,2(3)	O24	C78	O63	121,9(13)
O57	Nd6	O31	134,3(3)	O24	C78	C74	119,9(15)
O12	Nd6	O31	72,4(3)	O63	C78	C74	118,0(14)
O37	Nd6	O31	81,6(3)	O68	C79	O69	124,2(14)
O23	Nd6	O63	148,5(3)	O68	C79	C130	119,3(15)
O21	Nd6	O63	97,4(3)	O69	C79	C130	116,5(15)
O57	Nd6	O63	72,7(3)	O57	C80	O66	120,5(13)
O12	Nd6	O63	70,6(3)	O57	C80	C88	120,4(15)
O37	Nd6	O63	108,1(3)	O66	C80	C88	119,1(16)
O31	Nd6	O63	135,7(3)	O57	C80	Nd6	58,9(7)
O23	Nd6	O66	77,1(4)	O66	C80	Nd6	61,7(7)
O21	Nd6	O66	126,9(3)	C88	C80	Nd6	173,4(14)
O57	Nd6	O66	52,5(3)	O25	C83	O30	119,9(14)
O12	Nd6	O66	124,3(3)	O25	C83	C85	121,9(16)
O37	Nd6	O66	77,9(3)	O30	C83	C85	118,2(16)
O31	Nd6	O66	146,2(3)	O25	C83	Nd8	60,8(8)
O63	Nd6	O66	76,8(4)	O30	C83	Nd8	59,1(7)
O23	Nd6	C80	74,6(4)	C85	C83	Nd8	177,2(14)
O21	Nd6	C80	100,2(5)	O44	C84	O26	120,1(15)
O57	Nd6	C80	25,6(4)	O44	C84	C93	122,3(15)
O12	Nd6	C80	140,4(4)	O26	C84	C93	117,3(15)
O37	Nd6	C80	104,2(4)	O44	C84	Nd3	59,4(9)
O31	Nd6	C80	147,1(4)	O26	C84	Nd3	62,6(9)
O63	Nd6	C80	74,1(4)	C93	C84	Nd3	171,4(14)
O66	Nd6	C80	27,0(4)	O50	C86	O61	123,3(14)
O23	Nd6	Nd4	121,3(2)	O50	C86	C112	118,4(13)
O21	Nd6	Nd4	139,5(2)	O61	C86	C112	118,4(15)
O57	Nd6	Nd4	136,5(3)	O15	C87	O28	117,4(15)
O12	Nd6	Nd4	38,4(2)	O15	C87	C103	123,4(14)
O37	Nd6	Nd4	38,3(2)	O28	C87	C103	118,7(14)
O31	Nd6	Nd4	89,09(19)	O15	C87	Nd1	57,4(8)
O63	Nd6	Nd4	76,5(2)	O28	C87	Nd1	60,1(8)
O66	Nd6	Nd4	91,2(2)	C103	C87	Nd1	174,1(13)
C80	Nd6	Nd4	115,8(4)	O38	C91	O54	126,3(15)
O23	Nd6	Nd10	63,3(3)	O38	C91	C125	117,7(15)

O21	Nd6	Nd10	35,3(2)	O54	C91	C125	116,0(15)
O57	Nd6	Nd10	97,9(3)	O35	C94	O67	122,0(14)
O12	Nd6	Nd10	99,5(2)	O35	C94	C105	120,6(14)
O37	Nd6	Nd10	114,2(2)	O67	C94	C105	117,4(15)
O31	Nd6	Nd10	37,0(2)	O35	C94	Nd4	64,0(8)
O63	Nd6	Nd10	130,5(3)	O67	C94	Nd4	58,0(7)
O66	Nd6	Nd10	135,7(2)	C105	C94	Nd4	175,3(12)
C80	Nd6	Nd10	117,1(4)	O51	C96	O32	124,9(14)
Nd4	Nd6	Nd10	125,51(3)	O51	C96	C122	117,0(15)
O26	Nd7	O48	73,4(3)	O32	C96	C122	118,1(14)
O26	Nd7	O34	78,5(3)	O17	C97	O52	119,5(14)
O48	Nd7	O34	134,3(3)	O17	C97	C119	119,8(14)
O26	Nd7	O50	86,4(3)	O52	C97	C119	120,7(13)
O48	Nd7	O50	74,3(4)	O17	C97	Nd8	58,8(7)
O34	Nd7	O50	139,1(4)	O52	C97	Nd8	60,9(7)
O26	Nd7	O15	145,0(3)	C119	C97	Nd8	176,1(10)
O48	Nd7	O15	75,2(3)	O55	C98	O59	120,0(13)
O34	Nd7	O15	135,9(3)	O55	C98	C82	118,3(13)
O50	Nd7	O15	70,4(3)	O59	C98	C82	121,3(12)
O26	Nd7	O33	76,6(4)	O55	C98	Nd1	59,9(7)
O48	Nd7	O33	133,7(4)	O59	C98	Nd1	60,2(7)
O34	Nd7	O33	70,2(4)	C82	C98	Nd1	170,2(12)
O50	Nd7	O33	69,4(4)	O72	C99	O64	123,7(13)
O15	Nd7	O33	116,4(3)	O72	C99	C100	120,9(13)
O26	Nd7	O58	122,2(3)	O64	C99	C100	115,3(12)
O48	Nd7	O58	88,5(3)	O46	C104	O19	120,4(15)
O34	Nd7	O58	76,8(4)	O46	C104	C101	121,1(12)
O50	Nd7	O58	141,2(3)	O19	C104	C101	118,4(14)
O15	Nd7	O58	71,6(3)	O46	C104	Nd4	59,5(8)
O33	Nd7	O58	137,6(4)	O19	C104	Nd4	61,0(8)
O26	Nd7	O18	143,9(3)	C101	C104	Nd4	178,6(12)
O48	Nd7	O18	139,7(3)	O40	C106	O39	117,9(14)
O34	Nd7	O18	80,7(3)	O40	C106	C92	120,8(12)
O50	Nd7	O18	90,4(3)	O39	C106	C92	121,3(13)
O15	Nd7	O18	64,5(3)	O48	C107	O27	126,9(15)
O33	Nd7	O18	68,7(3)	O48	C107	C129	117,3(15)
O58	Nd7	O18	80,6(3)	O27	C107	C129	115,1(14)
O26	Nd7	O29	72,2(3)	O56	C108	O21	117,8(14)
O48	Nd7	O29	69,1(3)	O56	C108	C121	123,1(15)
O34	Nd7	O29	68,3(3)	O21	C108	C121	119,1(14)
O50	Nd7	O29	141,5(3)	O56	C108	Nd10	60,2(8)
O15	Nd7	O29	110,3(3)	O21	C108	Nd10	57,7(7)
O33	Nd7	O29	131,8(3)	C121	C108	Nd10	175,8(12)
O58	Nd7	O29	50,3(3)	O43	C109	O12	118,6(15)
O18	Nd7	O29	125,7(3)	O43	C109	C115	123,7(15)
O26	Nd7	C120	97,8(4)	O12	C109	C115	117,6(14)
O48	Nd7	C120	79,8(4)	O43	C109	Nd4	60,0(9)
O34	Nd7	C120	69,0(4)	O12	C109	Nd4	59,1(8)
O50	Nd7	C120	151,4(4)	C115	C109	Nd4	171,2(12)
O15	Nd7	C120	91,6(4)	O34	C110	O49	120,8(15)
O33	Nd7	C120	139,2(4)	O34	C110	C127	120,5(14)
O58	Nd7	C120	24,5(3)	O49	C110	C127	118,6(14)
O18	Nd7	C120	102,0(4)	O16	C113	O14	119,1(13)
O29	Nd7	C120	25,9(4)	O16	C113	C128	121,2(16)

O26	Nd7	Nd3	38,2(3)	O14	C113	C128	119,7(17)
O48	Nd7	Nd3	66,8(2)	O16	C113	Nd10	60,9(8)
O34	Nd7	Nd3	68,8(2)	O14	C113	Nd10	58,2(7)
O50	Nd7	Nd3	118,3(2)	C128	C113	Nd10	177,8(14)
O15	Nd7	Nd3	135,1(2)	O60	C117	O33	122,2(14)
O33	Nd7	Nd3	107,1(2)	O60	C117	C123	119,2(15)
O58	Nd7	Nd3	84,1(2)	O33	C117	C123	118,5(16)
O18	Nd7	Nd3	148,3(2)	O60	C117	Nd2	60,3(8)
O29	Nd7	Nd3	33,95(18)	O33	C117	Nd2	62,0(7)
C120	Nd7	Nd3	59,6(3)	C123	C117	Nd2	172,1(14)
O68	Nd8	O65	79,4(4)	O42	C118	O37	122,5(14)
O68	Nd8	O30	140,2(4)	O42	C118	C90	120,3(15)
O65	Nd8	O30	78,9(4)	O37	C118	C90	117,1(15)
O68	Nd8	O17	92,6(4)	O58	C120	O29	117,5(14)
O65	Nd8	O17	114,7(3)	O58	C120	C114	124,9(14)
O30	Nd8	O17	126,8(3)	O29	C120	C114	117,5(14)
O68	Nd8	O28	69,9(4)	O58	C120	Nd7	57,8(8)
O65	Nd8	O28	141,6(3)	O29	C120	Nd7	60,1(8)
O30	Nd8	O28	110,9(4)	C114	C120	Nd7	172,0(13)
O17	Nd8	O28	89,7(3)	O53	C124	O23	124,5(14)
O68	Nd8	O25	147,5(4)	O53	C124	C126	117,9(16)
O65	Nd8	O25	74,9(3)	O23	C124	C126	117,6(17)

8.1.2 Europiumacetat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3$

Tabelle 55. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

Atom	x	y	z	Ueq
Eu1	0	0,128562(18)	1/4	0,0198(2)
Eu2	0	0,12247(2)	-1/4	0,0252(2)
O111	0,1986(10)	0,0666(2)	0,4565(14)	0,0480(17)
O112	0,0842(8)	0,08151(19)	0,5867(11)	0,0372(15)
C11	0,1845(11)	0,0586(2)	0,5956(15)	0,032(2)
C12	0,2793(19)	0,0205(4)	0,764(2)	0,074(4)
H12A	0,255	0,019	0,8585	0,15(3)
H12B	0,3914	0,0264	0,8553	0,15(3)
H12C	0,2521	-0,0083	0,6864	0,15(3)
O211	0,1641(8)	0,1818(2)	0,5278(11)	0,0396(15)
O212	0,1563(8)	0,1817(2)	0,7958(11)	0,0409(15)
C21	0,2023(12)	0,1980(3)	0,7050(16)	0,0316(18)
C22	0,3069(17)	0,2401(4)	0,805(2)	0,063(4)
H22A	0,333	0,2486	0,7171	0,15(3)
H22B	0,4034	0,2335	0,9569	0,15(3)
H22C	0,2513	0,265	0,8061	0,15(3)
O311	0,1631(7)	0,14355(18)	0,1635(10)	0,0297(13)
O312	0,2662(7)	0,0956(2)	0,0807(11)	0,0366(14)
C31	0,2818(9)	0,1206(3)	0,2193(13)	0,0278(17)
C32	0,4451(12)	0,1264(5)	0,458(2)	0,067(3)
H32A	0,4348	0,147	0,5422	0,15(3)
H32B	0,5201	0,139	0,4504	0,15(3)
H32C	0,4825	0,097	0,532	0,15(3)

Tabelle 56. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Eu1	0,0280(4)	0,0202(3)	0,0198(4)	0	0,0195(4)	0
Eu2	0,0256(5)	0,0385(4)	0,0196(5)	0	0,0185(4)	0
O111	0,068(5)	0,047(4)	0,056(5)	0,017(3)	0,053(4)	0,017(3)
O112	0,056(4)	0,032(3)	0,033(3)	0,008(2)	0,034(3)	0,018(3)
C11	0,047(5)	0,019(3)	0,025(5)	0,010(3)	0,023(4)	0,016(3)
C12	0,121(12)	0,050(7)	0,067(9)	0,032(5)	0,069(9)	0,050(7)
O211	0,054(4)	0,043(3)	0,035(4)	-0,010(3)	0,035(3)	-0,016(3)
O212	0,052(4)	0,047(3)	0,034(4)	-0,005(3)	0,033(3)	-0,011(3)
C21	0,040(5)	0,029(4)	0,033(5)	-0,004(3)	0,028(4)	-0,002(4)
C22	0,092(10)	0,055(6)	0,054(8)	-0,035(6)	0,053(8)	-0,051(7)
O311	0,028(3)	0,040(3)	0,028(3)	-0,001(2)	0,021(3)	-0,003(2)
O312	0,031(3)	0,052(4)	0,029(3)	-0,008(3)	0,022(3)	0,003(3)
C31	0,026(4)	0,040(4)	0,020(4)	0,008(3)	0,016(3)	0,003(3)
C32	0,025(4)	0,113(10)	0,047(7)	-0,005(7)	0,018(5)	0,008(6)

Tabelle 57. Atomabstände/Å von $\text{Eu}(\text{OAc})_3$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Eu1	O211	2,288(6)	Eu2	Eu1	3,9996(10)
Eu1	O211	2,288(6)	O111	C11	1,245(11)
Eu1	O311	2,396(6)	O112	C11	1,270(10)
Eu1	O311	2,396(6)	O112	Eu2	2,382(6)
Eu1	O111	2,452(7)	C11	C12	1,500(12)
Eu1	O111	2,452(7)	C12	H12A	0,96
Eu1	O112	2,566(6)	C12	H12B	0,96
Eu1	O112	2,566(6)	C12	H12C	0,96
Eu1	C11	2,894(7)	O211	C21	1,264(11)
Eu1	C11	2,894(7)	O212	C21	1,234(11)
Eu1	Eu2	3,9996(10)	O212	Eu2	2,306(6)
Eu1	Eu2	3,9996(10)	C21	C22	1,501(12)
Eu2	O212	2,306(6)	C22	H22A	0,96
Eu2	O212	2,306(6)	C22	H22B	0,96
Eu2	O112	2,382(6)	C22	H22C	0,96
Eu2	O112	2,382(6)	O311	C31	1,276(10)
Eu2	O312	2,443(6)	O312	C31	1,235(10)
Eu2	O312	2,443(6)	C31	C32	1,535(13)
Eu2	O311	2,557(6)	C32	H32A	0,96
Eu2	O311	2,557(6)	C32	H32B	0,96
Eu2	C31	2,863(8)	C32	H32C	0,96
Eu2	C31	2,863(8)			

Tabelle 58. Winkel/° von Eu(OAc)₃.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O211	Eu1	O211	95,1(3)	O212	Eu2	O311	78,8(2)
O211	Eu1	O311	83,1(2)	O112	Eu2	O311	67,43(19)
O211	Eu1	O311	82,8(2)	O112	Eu2	O311	128,5(2)
O211	Eu1	O311	82,8(2)	O312	Eu2	O311	51,61(19)
O211	Eu1	O311	83,1(2)	O312	Eu2	O311	140,7(2)
O311	Eu1	O311	159,1(3)	O311	Eu2	O311	152,3(2)
O211	Eu1	O111	158,1(2)	O212	Eu2	C31	75,4(2)
O211	Eu1	O111	93,5(3)	O212	Eu2	C31	106,3(2)
O311	Eu1	O111	118,0(2)	O112	Eu2	C31	102,1(2)
O311	Eu1	O111	78,3(2)	O112	Eu2	C31	76,8(2)
O211	Eu1	O111	93,5(3)	O312	Eu2	C31	153,1(2)
O211	Eu1	O111	158,1(2)	O312	Eu2	C31	25,4(2)
O311	Eu1	O111	78,3(2)	O311	Eu2	C31	26,5(2)
O311	Eu1	O111	118,0(2)	O311	Eu2	C31	154,7(2)
O111	Eu1	O111	85,7(4)	O212	Eu2	C31	106,3(2)
O211	Eu1	O112	150,2(2)	O212	Eu2	C31	75,4(2)
O211	Eu1	O112	81,4(2)	O112	Eu2	C31	76,8(2)
O311	Eu1	O112	67,08(19)	O112	Eu2	C31	102,1(2)
O311	Eu1	O112	125,6(2)	O312	Eu2	C31	25,4(2)
O111	Eu1	O112	51,3(2)	O312	Eu2	C31	153,1(2)
O111	Eu1	O112	81,1(2)	O311	Eu2	C31	154,7(2)
O211	Eu1	O112	81,4(2)	O311	Eu2	C31	26,5(2)
O211	Eu1	O112	150,2(2)	C31	Eu2	C31	177,8(3)
O311	Eu1	O112	125,6(2)	O212	Eu2	Eu1	108,61(17)
O311	Eu1	O112	67,08(19)	O212	Eu2	Eu1	67,36(17)
O111	Eu1	O112	81,1(2)	O112	Eu2	Eu1	146,71(14)
O111	Eu1	O112	51,3(2)	O112	Eu2	Eu1	37,64(14)
O112	Eu1	O112	115,7(3)	O312	Eu2	Eu1	105,91(16)
O211	Eu1	C11	175,2(3)	O312	Eu2	Eu1	75,77(16)
O211	Eu1	C11	87,1(2)	O311	Eu2	Eu1	34,81(12)
O311	Eu1	C11	92,9(2)	O311	Eu2	Eu1	143,13(12)
O311	Eu1	C11	101,7(2)	C31	Eu2	Eu1	55,50(17)
O111	Eu1	C11	25,2(2)	C31	Eu2	Eu1	124,62(17)
O111	Eu1	C11	82,9(3)	O212	Eu2	Eu1	67,36(17)
O112	Eu1	C11	26,0(2)	O212	Eu2	Eu1	108,61(17)
O112	Eu1	C11	98,8(2)	O112	Eu2	Eu1	37,64(14)
O211	Eu1	C11	87,1(2)	O112	Eu2	Eu1	146,71(14)
O211	Eu1	C11	175,2(3)	O312	Eu2	Eu1	75,77(16)
O311	Eu1	C11	101,7(2)	O312	Eu2	Eu1	105,91(16)
O311	Eu1	C11	92,9(2)	O311	Eu2	Eu1	143,13(12)
O111	Eu1	C11	82,9(3)	O311	Eu2	Eu1	34,81(12)
O111	Eu1	C11	25,2(2)	C31	Eu2	Eu1	124,62(17)
O112	Eu1	C11	98,8(2)	C31	Eu2	Eu1	55,50(17)
O112	Eu1	C11	26,0(2)	Eu1	Eu2	Eu1	174,94(2)
C11	Eu1	C11	91,0(3)	C11	O111	Eu1	97,6(5)
O211	Eu1	Eu2	66,46(16)	C11	O112	Eu2	153,5(6)
O211	Eu1	Eu2	117,32(16)	C11	O112	Eu1	91,6(5)
O311	Eu1	Eu2	144,00(14)	Eu2	O112	Eu1	107,8(2)
O311	Eu1	Eu2	37,53(14)	O111	C11	O112	119,5(7)
O111	Eu1	Eu2	91,71(17)	O111	C11	C12	119,9(9)
O111	Eu1	Eu2	84,57(17)	O112	C11	C12	120,4(10)

O112	Eu1	Eu2	140,97(12)	O111	C11	Eu1	57,1(4)
O112	Eu1	Eu2	34,54(12)	O112	C11	Eu1	62,4(4)
C11	Eu1	Eu2	116,24(18)	C12	C11	Eu1	176,4(7)
C11	Eu1	Eu2	59,73(19)	C11	C12	H12A	109,5
O211	Eu1	Eu2	117,32(16)	C11	C12	H12B	109,5
O211	Eu1	Eu2	66,46(16)	H12A	C12	H12B	109,5
O311	Eu1	Eu2	37,53(14)	C11	C12	H12C	109,5
O311	Eu1	Eu2	144,00(14)	H12A	C12	H12C	109,5
O111	Eu1	Eu2	84,57(17)	H12B	C12	H12C	109,5
O111	Eu1	Eu2	91,71(17)	C21	O211	Eu1	141,9(6)
O112	Eu1	Eu2	34,54(12)	C21	O212	Eu2	140,3(6)
O112	Eu1	Eu2	140,97(12)	O212	C21	O211	123,6(8)
C11	Eu1	Eu2	59,73(19)	O212	C21	C22	119,1(9)
C11	Eu1	Eu2	116,24(18)	O211	C21	C22	117,3(8)
Eu2	Eu1	Eu2	174,94(2)	C21	C22	H22A	109,5
O212	Eu2	O212	83,7(3)	C21	C22	H22B	109,5
O212	Eu2	O112	85,2(2)	H22A	C22	H22B	109,5
O212	Eu2	O112	145,7(2)	C21	C22	H22C	109,5
O212	Eu2	O112	145,7(2)	H22A	C22	H22C	109,5
O212	Eu2	O112	85,2(2)	H22B	C22	H22C	109,5
O112	Eu2	O112	120,2(3)	C31	O311	Eu1	129,1(5)
O212	Eu2	O312	131,5(2)	C31	O311	Eu2	90,3(5)
O212	Eu2	O312	79,2(2)	Eu1	O311	Eu2	107,7(2)
O112	Eu2	O312	84,2(2)	C31	O312	Eu2	96,7(5)
O112	Eu2	O312	77,5(2)	O312	C31	O311	120,4(7)
O212	Eu2	O312	79,2(2)	O312	C31	C32	120,9(8)
O212	Eu2	O312	131,5(2)	O311	C31	C32	118,6(8)
O112	Eu2	O312	77,5(2)	O312	C31	Eu2	57,9(4)
O112	Eu2	O312	84,2(2)	O311	C31	Eu2	63,2(4)
O312	Eu2	O312	142,8(3)	C32	C31	Eu2	169,0(7)
O212	Eu2	O311	78,8(2)	C31	C32	H32A	109,5
O212	Eu2	O311	80,7(2)	C31	C32	H32B	109,5
O112	Eu2	O311	128,5(2)	H32A	C32	H32B	109,5
O112	Eu2	O311	67,43(19)	C31	C32	H32C	109,5
O312	Eu2	O311	140,7(2)	H32A	C32	H32C	109,5
O312	Eu2	O311	51,61(19)	H32B	C32	H32C	109,5
O212	Eu2	O311	80,7(2)				

8.1.3 Thuliumacetat, Tm(OAc)₃

Tabelle 59. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / 10⁻¹·pm² von Tm(OAc)₃.

Atom	x	y	z	Ueq
Tm	0,95229(2)	0	0,35913(11)	0,01879(8)
O2	1,1145(5)	0,1147(3)	0,4496(5)	0,0412(10)
O3	1,1267(6)	0	0,1417(6)	0,0275(10)
C4	1,2776(8)	0	0,1047(8)	0,0245(15)
C5	1,1799(6)	0,1487(4)	0,5754(7)	0,0314(12)
O6	1,1634(5)	0,1139(3)	0,7119(5)	0,0429(10)
O7	1,3109(7)	0	-0,0364(8)	0,064(2)

C8	1,4054(10)	0	0,2324(12)	0,058(3)
H8A	1,3553	0	0,3365	0,15(3)
H8B	1,4714	0,0561	0,2212	0,15(3)
H8C	1,4714	-0,0561	0,2212	0,15(3)
C9	1,2805(15)	0,2353(6)	0,5562(10)	0,087(4)
H9A	1,2821	0,2539	0,445	0,15(3)
H9B	1,3886	0,222	0,5914	0,15(3)
H9C	1,2362	0,2863	0,6196	0,15(3)

Tabelle 60. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von Tm(OAc)₃.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Tm	0,01978(11)	0,02680(12)	0,00978(13)	0	-0,0014(4)	0
O2	0,053(2)	0,045(2)	0,026(2)	0,0031(17)	-0,0010(19)	-0,023(2)
O3	0,019(2)	0,043(3)	0,020(3)	0	0,001(2)	0
C4	0,016(3)	0,049(4)	0,008(4)	0	-0,004(2)	0
C5	0,038(3)	0,028(2)	0,028(4)	0,002(2)	0,001(2)	-0,011(2)
O6	0,052(2)	0,046(2)	0,031(3)	0,0058(18)	-0,005(2)	-0,024(2)
O7	0,030(3)	0,145(7)	0,016(4)	0	0,009(2)	0
C8	0,026(4)	0,125(10)	0,021(6)	0	-0,014(3)	0
C9	0,149(10)	0,063(6)	0,048(7)	0,012(4)	-0,015(6)	-0,072(6)

Tabelle 61. Atomabstände/Å von Tm(OAc)₃.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Tm	O2	2,223(4)	O3	C4	1,287(8)
Tm	O2	2,223(4)	O3	Tm	2,439(5)
Tm	O6	2,226(4)	C4	O7	1,205(9)
Tm	O6	2,226(4)	C4	C8	1,499(10)
Tm	O3	2,314(5)	C4	Tm	2,792(6)
Tm	O7	2,346(6)	C5	O6	1,242(7)
Tm	O3	2,439(5)	C5	C9	1,479(8)
Tm	C4	2,792(6)	O6	Tm	2,226(4)
O2	C5	1,270(7)	O7	Tm	2,346(6)

Tabelle 62. Winkel/° von Tm(OAc)₃.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O2	Tm	O2	92,3(2)	O2	Tm	C4	99,48(16)
O2	Tm	O6	164,25(15)	O6	Tm	C4	96,24(15)
O2	Tm	O6	85,99(17)	O6	Tm	C4	96,24(15)
O2	Tm	O6	85,99(17)	O3	Tm	C4	175,63(19)
O2	Tm	O6	164,25(15)	O7	Tm	C4	25,3(2)
O6	Tm	O6	91,4(2)	O3	Tm	C4	27,43(18)
O2	Tm	O3	83,51(15)	C5	O2	Tm	143,7(4)

O2	Tm	O3	83,51(15)	C4	O3	Tm	142,4(5)
O6	Tm	O3	80,74(14)	C4	O3	Tm	91,7(4)
O6	Tm	O3	80,74(14)	Tm	O3	Tm	125,8(2)
O2	Tm	O7	115,86(16)	O7	C4	O3	117,0(6)
O2	Tm	O7	115,86(16)	O7	C4	C8	121,9(7)
O6	Tm	O7	78,68(16)	O3	C4	C8	121,1(7)
O6	Tm	O7	78,68(16)	O7	C4	Tm	56,2(4)
O3	Tm	O7	150,4(2)	O3	C4	Tm	60,8(4)
O2	Tm	O3	80,58(14)	C8	C4	Tm	178,1(5)
O2	Tm	O3	80,58(14)	O6	C5	O2	124,1(5)
O6	Tm	O3	114,47(13)	O6	C5	C9	118,7(6)
O6	Tm	O3	114,47(13)	O2	C5	C9	117,2(5)
O3	Tm	O3	156,94(12)	C5	O6	Tm	146,1(4)
O7	Tm	O3	52,7(2)	C4	O7	Tm	98,5(4)
O2	Tm	C4	99,48(16)				

8.1.4 Ytterbiumacetat, Yb(OAc)₃

Tabelle 63. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / 10⁻¹·pm² von Yb(OAc)₃.

Atom	x	y	z	Ueq
Yb	0	0,05242(4)	0,22791(16)	0,01738(14)
O1	0	0,1239(8)	-0,0592(10)	0,0297(15)
O2	0,1160(4)	-0,1038(8)	0,1405(8)	0,0554(19)
O3	0,1124(5)	-0,1670(9)	-0,1234(8)	0,059(2)
O4	0	0,3111(11)	0,1177(12)	0,098(5)
C1	0	0,2751(13)	-0,0222(15)	0,056(4)
C2	0	0,4007(17)	-0,155(2)	0,114(11)
H2A	0	0,3482	-0,2593	0,065(15)
H2B	0,0565	0,4668	-0,1455	0,065(15)
H2C	-0,0565	0,4668	-0,1455	0,065(15)
C3	0,1495(7)	-0,1715(19)	0,0139(11)	0,077(4)
C4	0,2408(12)	-0,253(4)	0,030(2)	0,26(2)
H4A	0,2619	-0,2481	0,1407	0,065(15)
H4B	0,2876	-0,2018	-0,039	0,065(15)
H4C	0,2336	-0,3638	-0,0023	0,065(15)

Tabelle 64. Anisotrope Temperaturfaktoren/ 10⁻¹·pm² von Yb(OAc)₃.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Yb	0,02217(17)	0,01953(17)	0,01045(18)	-0,0016(7)	0	0
O1	0,052(4)	0,018(3)	0,019(4)	-0,001(3)	0	0
O2	0,051(3)	0,089(5)	0,026(4)	-0,001(3)	-0,003(3)	0,045(3)
O3	0,066(4)	0,083(5)	0,029(4)	-0,004(3)	-0,005(3)	0,052(4)
O4	0,256(16)	0,027(5)	0,010(6)	-0,010(4)	0	0
C1	0,136(14)	0,017(5)	0,015(9)	0,013(4)	0	0
C2	0,29(4)	0,028(7)	0,021(11)	0,009(5)	0	0
C3	0,060(6)	0,154(12)	0,016(6)	-0,003(7)	-0,001(4)	0,070(7)
C4	0,175(17)	0,54(5)	0,055(14)	-0,10(2)	-0,046(12)	0,30(3)

Tabelle 65. Atomabstände/Å von Yb(OAc)₃.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Yb	O2	2,188(5)	Yb	Yb	4,2029(5)
Yb	O2	2,188(5)	O1	C1	1,290(13)
Yb	O3	2,198(6)	O1	Yb	2,281(7)
Yb	O3	2,198(6)	O2	C3	1,271(11)
Yb	O1	2,281(7)	O3	C3	1,241(11)
Yb	O4	2,329(10)	O3	Yb	2,198(6)
Yb	O1	2,435(8)	O4	C1	1,189(15)
Yb	C1	2,764(10)	C1	C2	1,511(16)
Yb	Yb	4,2029(5)	C3	C4	1,442(14)

Tabelle 66. Winkel/° von Yb(OAc)₃.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O2	Yb	O2	94,8(4)	O3	Yb	Yb	129,32(17)
O2	Yb	O3	163,9(2)	O3	Yb	Yb	129,32(17)
O2	Yb	O3	85,2(3)	O1	Yb	Yb	128,2(2)
O2	Yb	O3	85,2(3)	O4	Yb	Yb	79,0(2)
O2	Yb	O3	163,9(2)	O1	Yb	Yb	26,03(15)
O3	Yb	O3	90,4(4)	C1	Yb	Yb	53,9(3)
O2	Yb	O1	82,7(2)	O2	Yb	Yb	101,48(17)
O2	Yb	O1	82,7(2)	O2	Yb	Yb	101,48(17)
O3	Yb	O1	81,4(2)	O3	Yb	Yb	62,95(16)
O3	Yb	O1	81,4(2)	O3	Yb	Yb	62,95(16)
O2	Yb	O4	114,7(2)	O1	Yb	Yb	27,93(19)
O2	Yb	O4	114,7(2)	O4	Yb	Yb	124,8(2)
O3	Yb	O4	79,5(3)	O1	Yb	Yb	177,85(15)
O3	Yb	O4	79,5(3)	C1	Yb	Yb	150,0(3)
O1	Yb	O4	152,8(3)	Yb	Yb	Yb	156,122(17)
O2	Yb	O1	79,9(2)	C1	O1	Yb	143,5(8)
O2	Yb	O1	79,9(2)	C1	O1	Yb	90,4(7)
O3	Yb	O1	115,74(19)	Yb	O1	Yb	126,0(3)
O3	Yb	O1	115,74(19)	C3	O2	Yb	143,1(6)
O1	Yb	O1	154,22(19)	C3	O3	Yb	144,4(6)
O4	Yb	O1	53,0(3)	C1	O4	Yb	98,4(7)
O2	Yb	C1	98,7(3)	O4	C1	O1	118,2(10)
O2	Yb	C1	98,7(3)	O4	C1	C2	121,9(11)
O3	Yb	C1	97,2(2)	O1	C1	C2	119,9(11)
O3	Yb	C1	97,2(2)	O4	C1	Yb	56,5(6)
O1	Yb	C1	178,0(3)	O1	C1	Yb	61,7(6)
O4	Yb	C1	25,2(3)	C2	C1	Yb	178,3(9)
O1	Yb	C1	27,8(3)	O3	C3	O2	125,5(8)
O2	Yb	Yb	63,64(17)	O3	C3	C4	117,4(10)
O2	Yb	Yb	63,64(17)	O2	C3	C4	117,1(9)

8.2 Acetathydrate

8.2.1 Neodymacetat, $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$

Tabelle 67. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom	x	y	z	Ueq
Nd1	-0,090155(15)	0,358517(11)	0,39723(2)	0,01579(7)
Nd2	-0,330654(18)	0,248044(13)	0,19884(3)	0,01916(7)
O3	0,0374(3)	0,3156(2)	0,7027(5)	0,0240(7)
O4	-0,0695(3)	0,3935(2)	0,7016(5)	0,0262(8)
O5	-0,2171(3)	0,2888(2)	0,1069(5)	0,0265(8)
O6	0,0130(3)	0,2584(2)	0,3782(6)	0,0255(8)
O7	-0,4557(2)	0,0753(2)	-0,0827(6)	0,0321(9)
O8	-0,1533(3)	0,2339(2)	0,4443(6)	0,0270(8)
O9	-0,3137(3)	0,1295(2)	0,0780(6)	0,0335(9)
O10	-0,2604(3)	0,1717(3)	0,4815(6)	0,0364(9)
O11	-0,3720(3)	0,3393(2)	0,3755(6)	0,0335(8)
O12	-0,1430(3)	0,3888(2)	0,0751(5)	0,0244(7)
C13	-0,3281(2)	0,02242(18)	-0,1100(5)	0,0410(15)
H13A	-0,3778	-0,0107	-0,1934	0,125(11)
H13B	-0,2811	-0,0088	-0,0158	0,125(11)
H13C	-0,2997	0,0497	-0,1694	0,125(11)
O14	-0,1179(2)	0,49930(18)	0,3777(5)	0,0293(8)
C15	-0,2005(3)	0,3343(3)	0,0070(6)	0,0200(9)
O16	0,0816(4)	0,1454(2)	0,4844(7)	0,0448(13)
C17	-0,0565(5)	0,1437(4)	0,1980(10)	0,0461(17)
H17A	-0,1018	0,1813	0,1204	0,125(11)
H17B	-0,088	0,1045	0,2296	0,125(11)
H17C	-0,0261	0,1196	0,1385	0,125(11)
C18	0,0019(4)	0,3503(3)	0,7880(7)	0,0228(10)
C19	0,0161(4)	0,1839(3)	0,3627(7)	0,0281(11)
O20	-0,2510(3)	0,3772(2)	0,3451(6)	0,0285(9)
C21	0,0448(4)	0,3385(4)	0,9842(8)	0,0379(13)
H21A	0,098	0,3039	1,0246	0,125(11)
H21B	-0,0014	0,3162	1,0103	0,125(11)
H21C	0,0654	0,3879	1,0436	0,125(11)
C22	-0,3254(4)	0,4735(4)	0,4373(10)	0,0382(14)
H22A	-0,277	0,5053	0,4356	0,125(11)
H22B	-0,3178	0,4733	0,555	0,125(11)
H22C	-0,3864	0,4942	0,3553	0,125(11)
C23	-0,3174(3)	0,3920(3)	0,3845(7)	0,0240(10)
C24	-0,1763(4)	0,1848(3)	0,5306(7)	0,0274(11)
C25	-0,1003(5)	0,1431(6)	0,6841(13)	0,073(3)
H25A	-0,04	0,1609	0,7031	0,125(11)
H25B	-0,106	0,088	0,6606	0,125(11)
H25C	-0,1057	0,1533	0,7884	0,125(11)
C26	-0,3684(3)	0,0806(3)	-0,0339(8)	0,0268(10)
C27	-0,2520(5)	0,3207(4)	-0,1911(8)	0,0448(16)
H27A	-0,2929	0,2762	-0,2182	0,125(11)
H27B	-0,2069	0,3111	-0,2309	0,125(11)
H27C	-0,2889	0,3659	-0,2503	0,125(11)

Tabelle 68. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Nd1	0,01457(10)	0,01531(10)	0,01697(11)	0,00024(9)	0,00730(8)	-0,00044(9)
Nd2	0,01640(11)	0,01862(11)	0,02051(12)	0,00058(11)	0,00749(9)	-0,00349(8)
O3	0,0228(17)	0,0284(19)	0,0218(18)	-0,0002(14)	0,0117(15)	0,0072(14)
O4	0,0239(18)	0,029(2)	0,026(2)	0,0011(16)	0,0124(16)	0,0131(15)
O5	0,0324(19)	0,0242(18)	0,0253(19)	0,0036(14)	0,0159(16)	-0,0027(15)
O6	0,0278(18)	0,0192(17)	0,031(2)	-0,0049(14)	0,0152(17)	-0,0007(14)
O7	0,0195(17)	0,0255(19)	0,049(3)	-0,0058(17)	0,0154(17)	0,0019(14)
O8	0,0247(18)	0,0240(18)	0,030(2)	0,0069(15)	0,0119(17)	-0,0030(14)
O9	0,0250(18)	0,0254(18)	0,047(2)	-0,0081(17)	0,0154(18)	-0,0019(14)
O10	0,0237(18)	0,046(2)	0,038(2)	0,0144(19)	0,0135(17)	-0,0053(16)
O11	0,0316(19)	0,034(2)	0,042(2)	-0,0073(17)	0,0232(18)	-0,0091(16)
O12	0,0293(19)	0,0238(17)	0,0220(18)	0,0006(14)	0,0140(16)	-0,0085(14)
C13	0,035(3)	0,038(3)	0,059(4)	-0,016(3)	0,029(3)	0,002(3)
O14	0,047(2)	0,0168(15)	0,042(2)	0,0021(15)	0,035(2)	-0,0001(13)
C15	0,020(2)	0,025(2)	0,014(2)	-0,0014(18)	0,0078(18)	-0,0014(18)
O16	0,043(3)	0,025(2)	0,039(3)	-0,0038(19)	-0,001(2)	0,0087(17)
C17	0,036(3)	0,045(4)	0,037(4)	-0,016(3)	0,001(3)	0,002(3)
C18	0,021(2)	0,024(2)	0,023(3)	-0,0028(19)	0,011(2)	0,0000(18)
C19	0,027(3)	0,028(3)	0,026(3)	-0,008(2)	0,011(2)	-0,001(2)
O20	0,0185(17)	0,0290(19)	0,039(2)	-0,0062(18)	0,0152(17)	-0,0004(15)
C21	0,032(3)	0,057(4)	0,022(3)	0,003(3)	0,011(2)	0,007(3)
C22	0,034(3)	0,029(3)	0,054(4)	-0,007(3)	0,024(3)	0,004(2)
C23	0,016(2)	0,026(2)	0,023(2)	-0,0032(19)	0,0047(18)	-0,0019(18)
C24	0,021(2)	0,031(3)	0,024(3)	0,008(2)	0,006(2)	-0,005(2)
C25	0,032(4)	0,090(7)	0,071(6)	0,054(5)	0,005(4)	-0,014(4)
C26	0,022(2)	0,020(2)	0,039(3)	0,000(2)	0,015(2)	0,0026(18)
C27	0,053(4)	0,056(4)	0,021(3)	-0,009(3)	0,014(3)	-0,021(3)

Tabelle 69. Atomabstände/Å von $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Nd1	O7	2,386(3)	O3	C18	1,280(6)
Nd1	O20	2,440(4)	O3	Nd2	2,414(3)
Nd1	O14	2,442(3)	O4	C18	1,266(6)
Nd1	O6	2,455(4)	O5	C15	1,283(6)
Nd1	O8	2,483(4)	O6	C19	1,286(6)
Nd1	O12	2,527(4)	O6	Nd2	2,689(4)
Nd1	O3	2,536(4)	O7	C26	1,268(6)
Nd1	O4	2,548(4)	O7	Nd1	2,386(3)
Nd1	O5	2,625(4)	O8	C24	1,293(6)
Nd1	C18	2,946(5)	O9	C26	1,259(7)
Nd1	C15	2,968(5)	O10	C24	1,233(6)
Nd1	Nd2	3,8970(5)	O11	C23	1,240(6)
Nd2	O9	2,357(4)	O12	C15	1,244(6)
Nd2	O3	2,414(3)	C13	C26	1,505(6)
Nd2	O5	2,435(4)	C15	C27	1,508(7)
Nd2	O16	2,489(4)	O16	C19	1,254(7)

Nd2	O11	2,490(4)	O16	Nd2	2,489(4)
Nd2	O10	2,495(4)	C17	C19	1,497(8)
Nd2	O20	2,560(4)	C18	C21	1,495(8)
Nd2	O8	2,619(4)	C19	Nd2	2,982(5)
Nd2	O6	2,689(4)	O20	C23	1,302(6)
Nd2	C23	2,888(5)	C22	C23	1,492(8)
Nd2	C24	2,936(5)	C24	C25	1,478(9)
Nd2	C19	2,982(5)			

Tabelle 70. Winkel/° von Nd(OAc)₃(H₂O)_{0,5}.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O7	Nd1	O20	143,78(14)	O9	Nd2	O6	76,43(13)
O7	Nd1	O14	70,56(12)	O3	Nd2	O6	66,35(12)
O20	Nd1	O14	73,39(12)	O5	Nd2	O6	99,22(12)
O7	Nd1	O6	73,07(13)	O16	Nd2	O6	49,99(13)
O20	Nd1	O6	141,28(13)	O11	Nd2	O6	104,72(13)
O14	Nd1	O6	142,43(11)	O10	Nd2	O6	137,20(12)
O7	Nd1	O8	146,15(12)	O20	Nd2	O6	122,48(13)
O20	Nd1	O8	69,78(13)	O8	Nd2	O6	159,75(12)
O14	Nd1	O8	141,48(11)	O9	Nd2	C23	170,36(13)
O6	Nd1	O8	76,09(13)	O3	Nd2	C23	101,78(13)
O7	Nd1	O12	77,89(13)	O5	Nd2	C23	94,13(13)
O20	Nd1	O12	90,69(14)	O16	Nd2	C23	69,34(16)
O14	Nd1	O12	76,69(12)	O11	Nd2	C23	25,29(13)
O6	Nd1	O12	86,92(13)	O10	Nd2	C23	91,77(15)
O8	Nd1	O12	114,18(13)	O20	Nd2	C23	26,79(12)
O7	Nd1	O3	79,01(13)	O8	Nd2	C23	82,87(13)
O20	Nd1	O3	119,05(14)	O6	Nd2	C23	112,46(12)
O14	Nd1	O3	112,78(12)	O9	Nd2	C24	83,41(16)
O6	Nd1	O3	68,29(13)	O3	Nd2	C24	99,19(13)
O8	Nd1	O3	76,92(13)	O5	Nd2	C24	90,15(13)
O12	Nd1	O3	150,10(11)	O16	Nd2	C24	154,07(15)
O7	Nd1	O4	99,05(14)	O11	Nd2	C24	89,51(15)
O20	Nd1	O4	75,54(14)	O10	Nd2	C24	24,57(13)
O14	Nd1	O4	76,48(11)	O20	Nd2	C24	81,60(15)
O6	Nd1	O4	118,79(12)	O8	Nd2	C24	26,12(13)
O8	Nd1	O4	83,77(14)	O6	Nd2	C24	155,91(13)
O12	Nd1	O4	152,40(11)	C23	Nd2	C24	88,71(15)
O3	Nd1	O4	50,89(11)	O9	Nd2	C19	97,39(15)
O7	Nd1	O5	123,23(14)	O3	Nd2	C19	82,32(14)
O20	Nd1	O5	67,31(13)	O5	Nd2	C19	88,57(13)
O14	Nd1	O5	110,52(12)	O16	Nd2	C19	24,44(15)
O6	Nd1	O5	82,04(13)	O11	Nd2	C19	90,23(15)
O8	Nd1	O5	64,63(13)	O10	Nd2	C19	156,87(13)
O12	Nd1	O5	50,09(11)	O20	Nd2	C19	96,98(15)
O3	Nd1	O5	136,06(13)	O8	Nd2	C19	152,34(13)
O4	Nd1	O5	137,39(12)	O6	Nd2	C19	25,55(13)
O7	Nd1	C18	90,27(15)	C23	Nd2	C19	90,36(15)
O20	Nd1	C18	96,68(15)	C24	Nd2	C19	178,36(16)
O14	Nd1	C18	95,72(13)	C18	O3	Nd2	150,1(4)
O6	Nd1	C18	93,52(14)	C18	O3	Nd1	95,4(3)

O8	Nd1	C18	77,96(14)	Nd2	O3	Nd1	113,30(15)
O12	Nd1	C18	167,50(13)	C18	O4	Nd1	95,2(3)
O3	Nd1	C18	25,62(13)	C15	O5	Nd2	146,3(3)
O4	Nd1	C18	25,34(12)	C15	O5	Nd1	92,3(3)
O5	Nd1	C18	142,35(12)	Nd2	O5	Nd1	100,68(13)
O7	Nd1	C15	99,91(14)	C19	O6	Nd1	139,6(3)
O20	Nd1	C15	79,11(14)	C19	O6	Nd2	90,1(3)
O14	Nd1	C15	94,06(13)	Nd1	O6	Nd2	106,91(14)
O6	Nd1	C15	83,11(14)	C26	O7	Nd1	145,3(3)
O8	Nd1	C15	89,82(14)	C24	O8	Nd1	155,6(4)
O12	Nd1	C15	24,52(12)	C24	O8	Nd2	90,8(3)
O3	Nd1	C15	150,53(12)	Nd1	O8	Nd2	99,57(13)
O4	Nd1	C15	154,54(12)	C26	O9	Nd2	136,2(3)
O5	Nd1	C15	25,59(12)	C24	O10	Nd2	98,2(3)
C18	Nd1	C15	167,77(13)	C23	O11	Nd2	95,6(3)
O7	Nd1	Nd2	160,85(11)	C15	O12	Nd1	98,0(3)
O20	Nd1	Nd2	39,92(10)	O12	C15	O5	119,5(4)
O14	Nd1	Nd2	109,74(8)	O12	C15	C27	121,6(5)
O6	Nd1	Nd2	101,53(8)	O5	C15	C27	118,9(5)
O8	Nd1	Nd2	41,51(9)	O12	C15	Nd1	57,5(3)
O12	Nd1	Nd2	83,54(8)	O5	C15	Nd1	62,1(3)
O3	Nd1	Nd2	116,67(9)	C27	C15	Nd1	177,1(4)
O4	Nd1	Nd2	99,57(9)	C19	O16	Nd2	100,4(3)
O5	Nd1	Nd2	37,88(8)	O4	C18	O3	118,2(5)
C18	Nd1	Nd2	108,56(10)	O4	C18	C21	122,1(5)
C15	Nd1	Nd2	60,98(9)	O3	C18	C21	119,7(5)
O9	Nd2	O3	85,02(13)	O4	C18	Nd1	59,5(3)
O9	Nd2	O5	80,39(13)	O3	C18	Nd1	59,0(3)
O3	Nd2	O5	161,66(14)	C21	C18	Nd1	174,6(4)
O9	Nd2	O16	116,76(17)	O16	C19	O6	119,6(5)
O3	Nd2	O16	98,72(15)	O16	C19	C17	120,3(5)
O5	Nd2	O16	78,29(16)	O6	C19	C17	120,1(5)
O9	Nd2	O11	159,09(14)	O16	C19	Nd2	55,2(3)
O3	Nd2	O11	76,70(12)	O6	C19	Nd2	64,4(3)
O5	Nd2	O11	119,41(12)	C17	C19	Nd2	175,4(4)
O16	Nd2	O11	76,57(17)	C23	O20	Nd1	157,3(4)
O9	Nd2	O10	83,37(16)	C23	O20	Nd2	90,8(3)
O3	Nd2	O10	74,70(12)	Nd1	O20	Nd2	102,37(14)
O5	Nd2	O10	114,22(12)	O11	C23	O20	119,9(5)
O16	Nd2	O10	158,61(17)	O11	C23	C22	122,3(5)
O11	Nd2	O10	82,09(15)	O20	C23	C22	117,8(5)
O9	Nd2	O20	145,19(12)	O11	C23	Nd2	59,1(3)
O3	Nd2	O20	128,32(13)	O20	C23	Nd2	62,4(3)
O5	Nd2	O20	68,46(13)	C22	C23	Nd2	166,5(4)
O16	Nd2	O20	72,60(17)	O10	C24	O8	120,1(5)
O11	Nd2	O20	51,62(12)	O10	C24	C25	121,2(5)
O10	Nd2	O20	95,23(15)	O8	C24	C25	118,7(5)
O9	Nd2	O8	87,62(14)	O10	C24	Nd2	57,3(3)
O3	Nd2	O8	125,30(12)	O8	C24	Nd2	63,1(3)
O5	Nd2	O8	65,36(12)	C25	C24	Nd2	172,3(6)
O16	Nd2	O8	132,16(13)	O9	C26	O7	123,8(5)
O11	Nd2	O8	94,65(13)	O9	C26	C13	118,8(4)
O10	Nd2	O8	50,60(11)	O7	C26	C13	117,4(4)
O20	Nd2	O8	65,87(12)				

8.2.2 Samariumacetat, $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ **Tabelle 71.** Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom	x	y	z	Ueq
Sm1	0,184815(18)	0,142170(11)	0,21522(3)	0,02598(7)
Sm2	0,44450(2)	0,248193(15)	0,51712(3)	0,03296(8)
O213	0,3127(3)	0,1840(3)	0,5150(6)	0,0407(10)
O223	0,5237(3)	0,3769(3)	0,6622(8)	0,0467(12)
O111	0,0590(4)	0,2123(3)	-0,0708(7)	0,0445(10)
O225	0,6219(4)	0,2351(3)	0,7660(8)	0,0512(13)
O201	0,4578(4)	0,1331(3)	0,3888(9)	0,0567(14)
O121	0,2849(4)	0,2423(3)	0,1915(8)	0,0473(12)
O211	0,1316(3)	0,1117(3)	-0,1042(6)	0,0403(9)
O101	0,3178(3)	0,0776(3)	0,2305(8)	0,0509(12)
O123	0,4039(4)	0,3380(3)	0,6934(9)	0,0551(13)
O125	0,5138(4)	0,1697(4)	0,7910(9)	0,0662(16)
C1	0,4046(4)	0,0834(3)	0,2771(10)	0,0416(13)
O113	0,2057(3)	0,1069(3)	0,5166(6)	0,0419(10)
O221	0,3572(5)	0,3510(4)	0,3054(11)	0,081(3)
C2	0,4467(7)	0,0256(5)	0,2051(16)	0,066(3)
H2A	0,5119	0,0386	0,2456	0,150(15)
H2B	0,4128	0,0269	0,0782	0,150(15)
H2C	0,4426	-0,0261	0,2453	0,150(15)
O10	0,1588(3)	0,0015(2)	0,1988(7)	0,0446(11)
C22	0,2212(7)	0,3605(6)	0,0231(14)	0,077(3)
H22A	0,1653	0,3294	-0,042	0,150(15)
H22B	0,2487	0,3726	-0,0513	0,150(15)
H22C	0,2048	0,4082	0,0609	0,150(15)
C25	0,5988(4)	0,1852(4)	0,8451(9)	0,0405(12)
C14	0,3184(6)	0,1626(6)	0,7952(10)	0,062(2)
H14A	0,3776	0,1896	0,8379	0,150(15)
H14B	0,3285	0,1131	0,8543	0,150(15)
H14C	0,2759	0,1937	0,8185	0,150(15)
C13	0,2760(4)	0,1493(3)	0,5982(8)	0,0328(11)
C11	0,0747(4)	0,1668(3)	-0,1699(8)	0,0343(11)
C23	0,4588(4)	0,3902(4)	0,7032(8)	0,0395(12)
C21	0,2908(5)	0,3156(4)	0,1812(9)	0,0438(14)
C12	0,0260(8)	0,1807(6)	-0,3629(10)	0,070(3)
H12A	-0,0058	0,2304	-0,3881	0,150(15)
H12B	-0,0194	0,1398	-0,4213	0,150(15)
H12C	0,0715	0,1808	-0,4048	0,150(15)
C24	0,4497(7)	0,4721(5)	0,7598(14)	0,061(2)
H24A	0,5064	0,501	0,7893	0,150(15)
H24B	0,44	0,4694	0,8613	0,150(15)
H24C	0,3968	0,4979	0,6647	0,150(15)
C26	0,6712(7)	0,1422(8)	1,0016(19)	0,104(6)
H26A	0,7298	0,1705	1,0517	0,150(15)
H26B	0,6803	0,091	0,966	0,150(15)
H26C	0,6501	0,1371	1,0883	0,150(15)

Tabelle 72. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm1	0,02429(10)	0,02467(10)	0,02880(11)	-0,00036(9)	0,01258(8)	0,00028(9)
Sm2	0,02848(12)	0,03104(12)	0,03730(14)	0,00035(11)	0,01409(10)	-0,00644(9)
O213	0,040(2)	0,047(2)	0,038(2)	0,0003(18)	0,0202(18)	-0,0122(18)
O223	0,029(2)	0,043(2)	0,063(3)	-0,014(2)	0,018(2)	-0,0045(18)
O111	0,054(3)	0,042(2)	0,043(2)	-0,0003(19)	0,027(2)	0,009(2)
O225	0,052(3)	0,046(3)	0,052(3)	0,011(2)	0,023(3)	-0,007(2)
O201	0,038(2)	0,047(3)	0,078(4)	-0,017(2)	0,022(2)	-0,0060(18)
O121	0,055(3)	0,038(2)	0,056(3)	0,009(2)	0,032(3)	0,001(2)
O211	0,047(2)	0,039(2)	0,036(2)	0,0011(17)	0,0202(19)	0,0127(18)
O101	0,032(2)	0,045(2)	0,072(3)	-0,007(2)	0,022(2)	-0,0011(19)
O123	0,052(3)	0,053(3)	0,070(3)	-0,016(3)	0,037(3)	-0,016(2)
O125	0,039(2)	0,077(4)	0,067(4)	0,025(3)	0,013(2)	-0,010(2)
C1	0,030(2)	0,034(3)	0,064(4)	-0,002(3)	0,026(3)	-0,001(2)
O113	0,037(2)	0,049(3)	0,036(2)	-0,0010(19)	0,0153(19)	-0,0147(19)
O221	0,068(4)	0,054(3)	0,070(4)	0,008(3)	-0,008(3)	-0,013(3)
C2	0,049(4)	0,054(5)	0,096(7)	-0,022(4)	0,037(4)	-0,001(3)
O10	0,067(3)	0,0293(18)	0,059(3)	-0,0008(18)	0,048(3)	-0,0001(17)
C22	0,065(5)	0,067(5)	0,058(5)	0,030(4)	-0,004(4)	-0,013(4)
C25	0,035(3)	0,041(3)	0,040(3)	0,012(2)	0,014(2)	-0,003(2)
C14	0,057(4)	0,103(6)	0,028(3)	-0,007(3)	0,022(3)	-0,022(4)
C13	0,029(2)	0,038(3)	0,031(3)	0,0019(19)	0,015(2)	-0,0079(19)
C11	0,039(3)	0,032(2)	0,037(3)	0,005(2)	0,023(2)	0,008(2)
C23	0,029(2)	0,042(3)	0,042(3)	-0,002(2)	0,013(2)	-0,001(2)
C21	0,043(3)	0,038(3)	0,045(3)	0,015(2)	0,016(3)	-0,003(2)
C12	0,090(6)	0,083(6)	0,034(3)	0,015(4)	0,029(4)	0,035(5)
C24	0,066(5)	0,048(4)	0,077(6)	-0,014(4)	0,041(5)	0,000(4)
C26	0,044(5)	0,117(9)	0,104(9)	0,072(8)	-0,002(5)	-0,003(5)

Tabelle 73. Atomabstände/Å von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Sm1	O101	2,356(5)	Sm2	C21	2,992(6)
Sm1	O121	2,424(5)	O213	C13	1,273(7)
Sm1	O10	2,428(4)	O223	C23	1,274(8)
Sm1	O223	2,432(5)	O223	Sm1	2,432(5)
Sm1	O225	2,454(5)	O111	C11	1,265(7)
Sm1	O211	2,512(5)	O111	Sm2	2,402(5)
Sm1	O213	2,514(5)	O225	C25	1,254(8)
Sm1	O113	2,524(5)	O225	Sm1	2,454(5)
Sm1	O111	2,611(5)	O201	C1	1,260(8)
Sm1	C13	2,899(6)	O121	C21	1,260(8)
Sm1	C11	2,946(6)	O211	C11	1,244(7)
Sm1	Sm2	3,8817(5)	O101	C1	1,260(7)
Sm2	O201	2,312(5)	O123	C23	1,229(8)
Sm2	O213	2,381(4)	O125	C25	1,246(8)
Sm2	O111	2,402(5)	C1	C2	1,491(10)
Sm2	O221	2,433(7)	O113	C13	1,239(7)

Sm2	O123	2,456(6)	O221	C21	1,247(9)
Sm2	O125	2,465(6)	C22	C21	1,494(10)
Sm2	O223	2,546(5)	C25	C26	1,486(10)
Sm2	O225	2,635(6)	C14	C13	1,511(9)
Sm2	O121	2,752(6)	C11	C12	1,477(9)
Sm2	C23	2,851(6)	C23	C24	1,510(10)
Sm2	C25	2,929(6)			

Tabelle 74. Winkel/° von Sm(OAc)₃(H₂O)_{0,5}.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O101	Sm1	O121	73,17(17)	O201	Sm2	O121	74,80(19)
O101	Sm1	O10	70,64(16)	O213	Sm2	O121	65,24(16)
O121	Sm1	O10	142,65(16)	O111	Sm2	O121	99,97(17)
O101	Sm1	O223	143,88(18)	O221	Sm2	O121	48,73(18)
O121	Sm1	O223	140,51(17)	O123	Sm2	O121	104,87(19)
O10	Sm1	O223	73,58(16)	O125	Sm2	O121	136,77(16)
O101	Sm1	O225	146,18(18)	O223	Sm2	O121	122,34(16)
O121	Sm1	O225	76,23(19)	O225	Sm2	O121	160,98(17)
O10	Sm1	O225	141,12(17)	O201	Sm2	C23	171,27(17)
O223	Sm1	O225	69,71(18)	O213	Sm2	C23	103,10(18)
O101	Sm1	O211	77,79(17)	O111	Sm2	C23	94,07(18)
O121	Sm1	O211	86,86(19)	O221	Sm2	C23	70,8(2)
O10	Sm1	O211	76,89(16)	O123	Sm2	C23	25,40(18)
O223	Sm1	O211	89,61(19)	O125	Sm2	C23	92,7(2)
O225	Sm1	O211	114,72(18)	O223	Sm2	C23	26,54(17)
O101	Sm1	O213	78,42(18)	O225	Sm2	C23	81,42(17)
O121	Sm1	O213	68,62(18)	O121	Sm2	C23	112,81(16)
O10	Sm1	O213	111,96(17)	O201	Sm2	C25	85,3(2)
O223	Sm1	O213	120,45(19)	O213	Sm2	C25	100,40(17)
O225	Sm1	O213	77,31(18)	O111	Sm2	C25	88,93(17)
O211	Sm1	O213	149,84(15)	O221	Sm2	C25	154,89(19)
O101	Sm1	O113	99,28(19)	O123	Sm2	C25	89,3(2)
O121	Sm1	O113	119,22(18)	O125	Sm2	C25	24,85(17)
O10	Sm1	O113	76,02(16)	O223	Sm2	C25	81,33(18)
O223	Sm1	O113	76,45(18)	O225	Sm2	C25	25,34(16)
O225	Sm1	O113	83,3(2)	O121	Sm2	C25	156,33(16)
O211	Sm1	O113	152,09(14)	C23	Sm2	C25	88,13(18)
O213	Sm1	O113	51,12(14)	O201	Sm2	C21	95,0(2)
O101	Sm1	O111	122,74(19)	O213	Sm2	C21	81,23(17)
O121	Sm1	O111	81,06(19)	O111	Sm2	C21	89,58(18)
O10	Sm1	O111	111,31(17)	O221	Sm2	C21	23,84(19)
O223	Sm1	O111	66,94(17)	O123	Sm2	C21	90,9(2)
O225	Sm1	O111	64,99(18)	O125	Sm2	C21	156,76(18)
O211	Sm1	O111	50,12(14)	O223	Sm2	C21	97,50(19)
O213	Sm1	O111	136,23(16)	O225	Sm2	C21	153,03(17)
O113	Sm1	O111	137,70(16)	O121	Sm2	C21	24,89(16)
O101	Sm1	C13	90,27(19)	C23	Sm2	C21	91,32(19)
O121	Sm1	C13	94,09(19)	C25	Sm2	C21	178,37(18)
O10	Sm1	C13	94,99(16)	C13	O213	Sm2	149,7(4)
O223	Sm1	C13	97,61(19)	C13	O213	Sm1	94,2(4)

O225	Sm1	C13	77,80(19)	Sm2	O213	Sm1	115,30(19)
O211	Sm1	C13	167,22(16)	C23	O223	Sm1	156,3(5)
O213	Sm1	C13	25,97(15)	C23	O223	Sm2	90,2(4)
O113	Sm1	C13	25,23(14)	Sm1	O223	Sm2	102,44(18)
O111	Sm1	C13	142,61(16)	C11	O111	Sm2	144,7(5)
O101	Sm1	C11	99,83(18)	C11	O111	Sm1	92,3(4)
O121	Sm1	C11	82,57(19)	Sm2	O111	Sm1	101,40(18)
O10	Sm1	C11	94,67(17)	C25	O225	Sm1	158,7(5)
O223	Sm1	C11	78,16(18)	C25	O225	Sm2	90,6(4)
O225	Sm1	C11	90,08(18)	Sm1	O225	Sm2	99,37(18)
O211	Sm1	C11	24,74(14)	C1	O201	Sm2	138,6(4)
O213	Sm1	C11	150,49(16)	C21	O121	Sm1	141,3(5)
O113	Sm1	C11	154,51(16)	C21	O121	Sm2	88,3(4)
O111	Sm1	C11	25,40(15)	Sm1	O121	Sm2	105,9(2)
C13	Sm1	C11	167,88(16)	C11	O211	Sm1	97,6(4)
O101	Sm1	Sm2	159,83(15)	C1	O101	Sm1	145,2(4)
O121	Sm1	Sm2	100,79(13)	C23	O123	Sm2	95,6(4)
O10	Sm1	Sm2	110,01(11)	C25	O125	Sm2	98,9(4)
O223	Sm1	Sm2	39,84(12)	O101	C1	O201	122,8(6)
O225	Sm1	Sm2	42,05(14)	O101	C1	C2	118,2(6)
O211	Sm1	Sm2	82,73(10)	O201	C1	C2	118,9(6)
O213	Sm1	Sm2	117,94(12)	C13	O113	Sm1	94,5(4)
O113	Sm1	Sm2	100,38(12)	C21	O221	Sm2	104,1(4)
O111	Sm1	Sm2	37,35(11)	O125	C25	O225	120,1(6)
C13	Sm1	Sm2	109,53(12)	O125	C25	C26	118,6(7)
C11	Sm1	Sm2	60,06(11)	O225	C25	C26	121,3(7)
O201	Sm2	O213	83,82(19)	O125	C25	Sm2	56,2(4)
O201	Sm2	O111	80,02(19)	O225	C25	Sm2	64,1(4)
O213	Sm2	O111	160,63(18)	C26	C25	Sm2	171,9(7)
O201	Sm2	O221	114,0(3)	O113	C13	O213	119,8(6)
O213	Sm2	O221	97,6(2)	O113	C13	C14	121,5(6)
O111	Sm2	O221	79,5(3)	O213	C13	C14	118,7(5)
O201	Sm2	O123	159,7(2)	O113	C13	Sm1	60,2(3)
O213	Sm2	O123	77,94(17)	O213	C13	Sm1	59,9(3)
O111	Sm2	O123	119,47(17)	C14	C13	Sm1	173,2(6)
O221	Sm2	O123	77,5(3)	O211	C11	O111	119,9(6)
O201	Sm2	O125	83,8(3)	O211	C11	C12	120,7(6)
O213	Sm2	O125	75,57(17)	O111	C11	C12	119,4(6)
O111	Sm2	O125	112,93(18)	O211	C11	Sm1	57,7(3)
O221	Sm2	O125	160,5(3)	O111	C11	Sm1	62,3(3)
O123	Sm2	O125	83,1(2)	C12	C11	Sm1	175,8(6)
O201	Sm2	O223	145,80(17)	O123	C23	O223	120,8(6)
O213	Sm2	O223	129,48(17)	O123	C23	C24	120,9(7)
O111	Sm2	O223	68,43(17)	O223	C23	C24	118,3(6)
O221	Sm2	O223	73,7(2)	O123	C23	Sm2	59,0(4)
O123	Sm2	O223	51,55(17)	O223	C23	Sm2	63,3(3)
O125	Sm2	O223	96,2(2)	C24	C23	Sm2	166,7(5)
O201	Sm2	O225	90,2(2)	O221	C21	O121	118,8(7)
O213	Sm2	O225	125,69(16)	O221	C21	C22	119,6(7)
O111	Sm2	O225	65,28(17)	O121	C21	C22	121,5(7)
O221	Sm2	O225	133,04(19)	O221	C21	Sm2	52,0(4)
O123	Sm2	O225	93,25(19)	O121	C21	Sm2	66,8(4)
O125	Sm2	O225	50,12(16)	C22	C21	Sm2	171,7(5)
O223	Sm2	O225	65,20(17)				

8.2.3 Erbiumacetat, $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$ **Tabelle 75.** Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom	x	y	z	Ueq
Er1	0,98790(3)	0,146365(19)	0,25429(4)	0,02196(10)
Er2	1,23597(3)	0,25725(2)	0,49081(3)	0,02600(11)
O111	1,0998(6)	0,2287(4)	0,5217(9)	0,0345(15)
O112	1,0398(6)	0,1165(4)	0,5658(9)	0,0345(15)
C11	1,0877(7)	0,1797(6)	0,6282(11)	0,0306(18)
C12	1,1319(11)	0,1975(10)	0,8238(14)	0,061(4)
H12A	1,115	0,1559	0,8845	0,16(3)
H12B	1,11	0,2489	0,8441	0,16(3)
H12C	1,1988	0,199	0,8679	0,16(3)
O211	1,2867(6)	0,1665(6)	0,3299(13)	0,050(2)
O212	1,1471(5)	0,1406(4)	0,3104(11)	0,0358(16)
C21	1,2181(7)	0,1196(6)	0,2834(13)	0,0306(18)
C22	1,2173(10)	0,0406(8)	0,195(2)	0,053(3)
H22A	1,1594	0,0129	0,1681	0,16(3)
H22B	1,2688	0,0079	0,2734	0,16(3)
H22C	1,223	0,0505	0,0875	0,16(3)
O311	1,0091(6)	0,2641(5)	0,1253(11)	0,0423(17)
O312	1,1455(6)	0,3268(5)	0,2448(11)	0,0433(18)
C31	1,0622(7)	0,3201(6)	0,1307(12)	0,0316(17)
C32	1,0231(10)	0,3875(11)	-0,003(2)	0,075(5)
H32A	1,0715	0,4264	0,0157	0,16(3)
H32B	0,9727	0,4135	0,0113	0,16(3)
H32C	1,0002	0,3656	-0,1205	0,16(3)
O411	1,3509(5)	0,3344(5)	0,4698(9)	0,0298(13)
O412	1,4689(5)	0,3932(4)	0,4562(9)	0,0323(14)
C41	1,3930(7)	0,3563(5)	0,3802(12)	0,0280(17)
C42	1,3510(10)	0,3366(10)	0,1849(13)	0,054(3)
H42A	1,3906	0,3577	0,1349	0,16(3)
H42B	1,29	0,3608	0,1263	0,16(3)
H42C	1,3457	0,2789	0,1692	0,16(3)
O511	0,8884(6)	0,2470(4)	0,2825(11)	0,0368(17)
O512	0,7918(7)	0,3486(6)	0,2011(15)	0,059(3)
C51	0,8688(7)	0,3177(7)	0,3024(14)	0,038(2)
C52	0,9374(13)	0,3686(9)	0,454(2)	0,087(7)
H52A	0,911	0,4212	0,4505	0,16(3)
H52B	0,9946	0,3741	0,4421	0,16(3)
H52C	0,9501	0,3427	0,5646	0,16(3)
O611	0,7271(5)	0,1370(5)	0,1476(12)	0,0402(18)
O612	0,8668(5)	0,0774(4)	0,2809(10)	0,0363(15)
C61	0,7813(7)	0,0814(6)	0,2466(12)	0,0305(17)
C62	0,7398(9)	0,0197(8)	0,319(2)	0,046(3)
H62A	0,6745	0,0313	0,2807	0,16(3)
H62B	0,7715	0,0209	0,4466	0,16(3)
H62C	0,7465	-0,033	0,2778	0,16(3)
O1	1,0194(6)	0,0072(4)	0,2719(10)	0,0359(15)
H1	1,006(6)	-0,016(5)	0,344(9)	0,01(2)
H2	1,013(11)	-0,016(8)	0,181(11)	0,05(4)

Tabelle 76. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Er1	0,01846(15)	0,02209(16)	0,02426(15)	0,00014(12)	0,00837(11)	-0,00023(13)
Er2	0,02024(17)	0,02503(17)	0,03078(18)	0,00075(13)	0,00937(13)	-0,00310(13)
O111	0,038(4)	0,033(3)	0,033(3)	0,001(3)	0,016(3)	-0,006(3)
O112	0,039(4)	0,030(3)	0,037(3)	-0,002(3)	0,019(3)	-0,009(3)
C11	0,029(5)	0,034(5)	0,022(3)	-0,005(3)	0,005(3)	-0,011(4)
C12	0,068(9)	0,089(10)	0,029(5)	-0,016(5)	0,023(5)	-0,032(8)
O211	0,032(4)	0,047(4)	0,078(6)	-0,021(4)	0,031(4)	-0,009(4)
O212	0,026(4)	0,037(4)	0,047(4)	0,000(3)	0,019(3)	0,002(3)
C21	0,024(4)	0,028(4)	0,041(4)	-0,015(3)	0,016(4)	-0,002(3)
C22	0,050(8)	0,034(6)	0,071(8)	-0,019(5)	0,022(6)	0,007(5)
O311	0,029(4)	0,039(4)	0,052(4)	0,007(3)	0,011(3)	-0,004(3)
O312	0,031(4)	0,035(4)	0,048(4)	0,015(3)	0,002(3)	-0,004(3)
C31	0,030(5)	0,030(4)	0,037(4)	-0,001(3)	0,016(4)	-0,006(3)
C32	0,035(7)	0,076(11)	0,086(10)	0,038(9)	0,000(6)	-0,010(7)
O411	0,020(3)	0,043(4)	0,030(3)	-0,002(3)	0,014(2)	-0,002(3)
O412	0,027(3)	0,037(4)	0,034(3)	-0,003(3)	0,014(3)	-0,010(3)
C41	0,028(5)	0,025(4)	0,030(4)	0,000(3)	0,011(3)	-0,003(3)
C42	0,047(7)	0,083(9)	0,025(4)	-0,011(5)	0,011(4)	-0,018(7)
O511	0,037(4)	0,028(3)	0,043(4)	-0,006(3)	0,014(3)	0,002(3)
O512	0,035(5)	0,054(6)	0,067(6)	-0,012(4)	0,001(4)	0,008(4)
C51	0,024(5)	0,040(5)	0,040(5)	-0,017(4)	0,006(4)	-0,001(4)
C52	0,077(11)	0,038(6)	0,088(11)	-0,051(7)	-0,018(8)	0,010(7)
O611	0,022(4)	0,041(4)	0,060(5)	0,015(3)	0,021(3)	0,006(3)
O612	0,027(3)	0,030(3)	0,053(4)	0,013(3)	0,018(3)	0,003(3)
C61	0,029(4)	0,027(4)	0,036(4)	0,003(3)	0,014(3)	-0,006(3)
C62	0,039(6)	0,039(6)	0,070(8)	0,010(5)	0,032(6)	0,004(5)
O1	0,054(4)	0,026(3)	0,045(4)	-0,002(3)	0,037(4)	-0,005(3)

Tabelle 77. Atomabstände/Å von $\text{Er}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{0,5}$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Er1	O311	2,319(8)	O112	C11	1,262(11)
Er1	O612	2,327(7)	C11	C12	1,503(12)
Er1	O1	2,341(7)	O211	C21	1,252(13)
Er1	O212	2,362(8)	O212	C21	1,290(12)
Er1	O511	2,373(8)	C21	C22	1,496(13)
Er1	O112	2,419(7)	O311	C31	1,239(12)
Er1	O411	2,443(7)	O312	C31	1,251(12)
Er1	O412	2,469(7)	C31	C32	1,505(17)
Er1	O111	2,556(7)	O411	C41	1,257(11)
Er1	C41	2,821(9)	O411	Er1	2,443(7)
Er1	C11	2,878(8)	O412	C41	1,248(12)
Er1	Er2	3,9582(6)	O412	Er1	2,469(7)
Er2	O611	2,225(8)	C41	C42	1,508(13)
Er2	O312	2,244(7)	C41	Er1	2,821(9)
Er2	O411	2,295(7)	O511	C51	1,238(12)
Er2	O111	2,335(8)	O511	Er2	2,580(8)

Er2	O512	2,361(9)	O512	C51	1,251(14)
Er2	O211	2,380(8)	O512	Er2	2,361(9)
Er2	O212	2,472(8)	C51	C52	1,513(14)
Er2	O511	2,580(8)	C51	Er2	2,823(9)
Er2	C21	2,798(8)	O611	C61	1,282(12)
Er2	C51	2,823(9)	O611	Er2	2,225(8)
Er2	Er1	3,9582(6)	O612	C61	1,260(12)
O111	C11	1,279(11)	C61	C62	1,481(14)

Tabelle 78. Winkel/° von Er(OAc)₃(H₂O)_{0,5}.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O311	Er1	O612	138,5(3)	O211	Er2	O212	53,7(3)
O311	Er1	O1	141,3(3)	O611	Er2	O511	74,8(3)
O612	Er1	O1	71,2(3)	O312	Er2	O511	147,3(3)
O311	Er1	O212	76,4(3)	O411	Er2	O511	68,9(2)
O612	Er1	O212	144,9(2)	O111	Er2	O511	114,8(3)
O1	Er1	O212	76,6(3)	O512	Er2	O511	51,9(3)
O311	Er1	O511	72,5(3)	O211	Er2	O511	96,3(3)
O612	Er1	O511	73,7(3)	O212	Er2	O511	127,3(2)
O1	Er1	O511	144,4(3)	O611	Er2	C21	171,1(3)
O212	Er1	O511	135,2(3)	O312	Er2	C21	89,7(3)
O311	Er1	O112	128,6(3)	O411	Er2	C21	105,7(3)
O612	Er1	O112	72,7(3)	O111	Er2	C21	93,3(3)
O1	Er1	O112	76,7(2)	O512	Er2	C21	76,5(4)
O212	Er1	O112	87,0(3)	O211	Er2	C21	26,4(3)
O511	Er1	O112	87,8(3)	O212	Er2	C21	27,5(3)
O311	Er1	O411	71,7(3)	O511	Er2	C21	111,4(3)
O612	Er1	O411	74,8(3)	O611	Er2	C51	90,7(3)
O1	Er1	O411	105,3(3)	O312	Er2	C51	172,7(3)
O212	Er1	O411	128,1(2)	O411	Er2	C51	91,0(3)
O511	Er1	O411	70,1(3)	O111	Er2	C51	99,3(3)
O112	Er1	O411	144,7(2)	O512	Er2	C51	26,0(3)
O311	Er1	O412	74,2(3)	O211	Er2	C51	87,0(4)
O612	Er1	O412	103,1(3)	O212	Er2	C51	102,7(3)
O1	Er1	O412	74,5(2)	O511	Er2	C51	26,0(3)
O212	Er1	O412	80,6(3)	C21	Er2	C51	92,9(3)
O511	Er1	O412	119,6(3)	O611	Er2	Er1	70,4(2)
O112	Er1	O412	150,5(2)	O312	Er2	Er1	113,0(2)
O411	Er1	O412	52,1(2)	O411	Er2	Er1	34,55(17)
O311	Er1	O111	77,1(3)	O111	Er2	Er1	141,06(17)
O612	Er1	O111	117,5(3)	O512	Er2	Er1	85,6(2)
O1	Er1	O111	114,8(3)	O211	Er2	Er1	93,4(2)
O212	Er1	O111	64,8(3)	O212	Er2	Er1	145,14(17)
O511	Er1	O111	77,2(3)	O511	Er2	Er1	35,19(17)
O112	Er1	O111	52,1(2)	C21	Er2	Er1	118,4(2)
O411	Er1	O111	140,0(3)	C51	Er2	Er1	59,8(2)
O412	Er1	O111	139,2(2)	C11	O111	Er2	129,4(7)
O311	Er1	C41	67,1(3)	C11	O111	Er1	91,0(5)
O612	Er1	C41	92,1(3)	Er2	O111	Er1	109,4(3)
O1	Er1	C41	92,9(2)	C11	O112	Er1	97,9(5)

O212	Er1	C41	103,0(3)	O112	C11	O111	118,7(8)
O511	Er1	C41	93,8(3)	O112	C11	C12	121,5(9)
O112	Er1	C41	163,6(2)	O111	C11	C12	119,8(9)
O411	Er1	C41	26,4(3)	O112	C11	Er1	56,4(4)
O412	Er1	C41	26,2(2)	O111	C11	Er1	62,6(5)
O111	Er1	C41	144,1(2)	C12	C11	Er1	175,1(8)
O311	Er1	C11	103,0(3)	C21	O211	Er2	95,8(6)
O612	Er1	C11	94,2(3)	C21	O212	Er1	156,5(7)
O1	Er1	C11	96,8(3)	C21	O212	Er2	90,5(6)
O212	Er1	C11	76,1(3)	Er1	O212	Er2	111,4(3)
O511	Er1	C11	80,3(3)	O211	C21	O212	119,2(8)
O112	Er1	C11	25,7(2)	O211	C21	C22	120,7(9)
O411	Er1	C11	150,2(3)	O212	C21	C22	120,1(9)
O412	Er1	C11	156,5(3)	O211	C21	Er2	57,8(5)
O111	Er1	C11	26,4(2)	O212	C21	Er2	62,1(5)
C41	Er1	C11	169,8(3)	C22	C21	Er2	172,3(9)
O311	Er1	Er2	73,8(2)	C31	O311	Er1	147,5(7)
O612	Er1	Er2	64,82(17)	C31	O312	Er2	133,9(7)
O1	Er1	Er2	124,4(2)	O311	C31	O312	124,6(9)
O212	Er1	Er2	149,21(18)	O311	C31	C32	118,1(10)
O511	Er1	Er2	38,79(19)	O312	C31	C32	117,2(9)
O112	Er1	Er2	117,83(19)	C41	O411	Er2	148,6(6)
O411	Er1	Er2	32,18(17)	C41	O411	Er1	93,8(6)
O412	Er1	Er2	84,04(17)	Er2	O411	Er1	113,3(3)
O111	Er1	Er2	114,82(19)	C41	O412	Er1	92,9(5)
C41	Er1	Er2	57,9(2)	O412	C41	O411	118,9(8)
C11	Er1	Er2	118,1(2)	O412	C41	C42	121,9(9)
O611	Er2	O312	87,8(3)	O411	C41	C42	119,3(9)
O611	Er2	O411	82,4(3)	O412	C41	Er1	60,9(5)
O312	Er2	O411	81,7(3)	O411	C41	Er1	59,8(5)
O611	Er2	O111	78,0(3)	C42	C41	Er1	165,9(8)
O312	Er2	O111	87,4(3)	C51	O511	Er1	153,0(8)
O411	Er2	O111	157,9(3)	C51	O511	Er2	88,0(6)
O611	Er2	O512	103,8(4)	Er1	O511	Er2	106,0(3)
O312	Er2	O512	160,7(3)	C51	O512	Er2	98,1(7)
O411	Er2	O512	114,6(3)	O511	C51	O512	121,4(10)
O111	Er2	O512	80,3(4)	O511	C51	C52	120,3(10)
O611	Er2	O211	162,3(3)	O512	C51	C52	118,3(10)
O312	Er2	O211	92,3(4)	O511	C51	Er2	65,9(5)
O411	Er2	O211	80,1(3)	O512	C51	Er2	55,9(6)
O111	Er2	O211	119,7(3)	C52	C51	Er2	171,9(10)
O512	Er2	O211	81,3(4)	C61	O611	Er2	138,2(7)
O611	Er2	O212	143,6(3)	C61	O612	Er1	143,6(6)
O312	Er2	O212	82,7(3)	O612	C61	O611	122,4(8)
O411	Er2	O212	130,2(3)	O612	C61	C62	119,9(9)
O111	Er2	O212	66,6(3)	O611	C61	C62	117,7(9)
O512	Er2	O212	78,9(3)				

8.2.4 Europiumacetat, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$ **Tabelle 79.** Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$.

Atom	x	y	z	Ueq
Eu1	0,18866(4)	0,14620(2)	0,23587(6)	0,02627(14)
Eu2	0,44122(3)	0,24171(3)	0,50023(4)	0,02843(15)
O213	0,3264(5)	0,1645(5)	0,5262(9)	0,0322(14)
O223	0,5286(6)	0,3595(4)	0,6844(11)	0,0390(17)
O111	0,0783(6)	0,2297(4)	-0,0354(10)	0,0356(16)
O225	0,6681(6)	0,2347(5)	0,8679(11)	0,0409(17)
O201	0,4501(6)	0,1325(5)	0,3413(12)	0,0433(18)
O121	0,2915(6)	0,2467(4)	0,2119(11)	0,0372(17)
O211	0,1349(5)	0,1171(4)	-0,0830(10)	0,0354(15)
O101	0,3098(5)	0,0760(5)	0,2068(10)	0,0364(15)
O123	0,3909(6)	0,3355(5)	0,6642(12)	0,0459(18)
O125	0,5323(5)	0,1718(5)	0,7567(11)	0,0420(18)
C1	0,3936(6)	0,0794(5)	0,2384(12)	0,0288(17)
O113	0,2080(5)	0,1080(5)	0,5409(10)	0,0362(16)
O221	0,3848(7)	0,3510(5)	0,2842(13)	0,049(2)
C2	0,4321(9)	0,0186(7)	0,1620(19)	0,047(3)
H2A	0,4965	0,0292	0,1987	0,17(3)
H2B	0,4002	0,0207	0,0352	0,17(3)
H2C	0,4249	-0,0337	0,2021	0,17(3)
O10	0,1568(5)	0,0053(4)	0,2189(10)	0,0377(16)
C22	0,2386(11)	0,3672(8)	0,034(2)	0,072(5)
H22A	0,1847	0,3347	-0,028	0,17(3)
H22B	0,2639	0,3826	-0,0465	0,17(3)
H22C	0,2219	0,4144	0,0787	0,17(3)
C25	0,6158(7)	0,1780(6)	0,8658(13)	0,035(2)
C14	0,3249(9)	0,1646(9)	0,8107(14)	0,049(3)
H14A	0,3829	0,1911	0,8421	0,17(3)
H14B	0,3346	0,1167	0,88	0,17(3)
H14C	0,284	0,1998	0,8333	0,17(3)
C13	0,2825(7)	0,1429(5)	0,6160(13)	0,0301(19)
C11	0,0892(7)	0,1800(6)	-0,1409(12)	0,0312(19)
C23	0,4576(7)	0,3808(6)	0,7109(14)	0,0332(19)
C21	0,3096(7)	0,3197(6)	0,1853(14)	0,034(2)
C12	0,0447(10)	0,1993(9)	-0,3378(15)	0,056(3)
H12A	0,0135	¼	-0,3571	0,17(3)
H12B	0,0011	0,158	-0,4008	0,17(3)
H12C	0,0915	0,2019	-0,3797	0,17(3)
C24	0,4617(9)	0,4611(7)	0,7932(19)	0,048(3)
H24A	0,5202	0,4858	0,8198	0,17(3)
H24B	0,4546	0,4547	0,9004	0,17(3)
H24C	0,4129	0,4945	0,7124	0,17(3)
C26	0,6529(8)	0,1084(6)	0,9966(16)	0,067(4)
H26A	0,7166	0,1178	1,0745	0,17(3)
H26B	0,6472	0,0592	0,9328	0,17(3)
H26C	0,6181	0,1043	1,0646	0,17(3)
O11	0,6917(8)	0,1435(6)	0,7483(16)	0,130(8)
O12	0,4410(8)	-0,0499(6)	-0,0069(16)	0,160(10)

Tabelle 80. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Eu1	0,0244(2)	0,0274(2)	0,0275(2)	0,00025(17)	0,01179(17)	0,00020(19)
Eu2	0,0252(2)	0,0293(2)	0,0307(2)	0,00011(18)	0,01203(18)	-0,00205(19)
O213	0,032(4)	0,039(3)	0,030(3)	0,004(3)	0,018(3)	0,003(3)
O223	0,031(4)	0,046(4)	0,042(4)	-0,003(3)	0,017(4)	0,001(3)
O111	0,041(4)	0,039(4)	0,031(4)	-0,002(3)	0,020(3)	0,005(3)
O225	0,040(4)	0,038(4)	0,043(4)	0,001(3)	0,016(3)	-0,007(3)
O201	0,037(4)	0,039(4)	0,054(5)	-0,013(4)	0,020(4)	-0,008(3)
O121	0,038(5)	0,034(4)	0,038(4)	0,004(3)	0,016(4)	0,004(3)
O211	0,037(4)	0,035(3)	0,036(4)	-0,001(3)	0,017(3)	0,009(3)
O101	0,028(3)	0,036(4)	0,042(4)	-0,002(3)	0,012(3)	-0,004(3)
O123	0,031(4)	0,046(4)	0,061(5)	-0,012(4)	0,020(4)	-0,006(3)
O125	0,029(4)	0,039(4)	0,046(4)	0,011(3)	0,005(3)	-0,004(3)
C1	0,023(4)	0,027(4)	0,038(5)	0,001(3)	0,015(4)	0,000(3)
O113	0,028(4)	0,043(4)	0,037(4)	-0,002(3)	0,014(3)	-0,007(3)
O221	0,041(5)	0,035(4)	0,059(5)	0,007(3)	0,012(4)	-0,010(3)
C2	0,043(7)	0,043(6)	0,062(8)	-0,016(5)	0,029(6)	-0,002(5)
O10	0,050(4)	0,029(3)	0,042(4)	-0,003(3)	0,028(4)	0,001(3)
C22	0,054(9)	0,044(7)	0,085(11)	0,035(7)	0,000(7)	-0,015(6)
C25	0,029(5)	0,038(5)	0,034(5)	0,001(4)	0,011(4)	-0,006(4)
C14	0,043(7)	0,082(8)	0,025(5)	-0,006(5)	0,017(5)	-0,011(6)
C13	0,030(5)	0,036(5)	0,029(4)	0,004(3)	0,017(4)	-0,001(4)
C11	0,035(5)	0,032(4)	0,026(4)	0,003(3)	0,012(4)	0,008(4)
C23	0,028(5)	0,036(5)	0,039(5)	-0,010(4)	0,018(4)	-0,003(4)
C21	0,028(5)	0,031(4)	0,037(5)	0,008(4)	0,007(4)	-0,006(4)
C12	0,060(8)	0,080(9)	0,032(6)	0,009(5)	0,024(6)	0,027(7)
C24	0,045(7)	0,035(6)	0,067(8)	-0,021(5)	0,027(6)	-0,008(5)
C26	0,045(8)	0,068(9)	0,076(10)	0,036(8)	0,014(7)	-0,001(6)
O11	0,103(13)	0,18(2)	0,125(14)	0,021(14)	0,063(11)	-0,001(14)
O12	0,13(2)	0,21(3)	0,15(2)	-0,004(18)	0,067(17)	0,001(18)

Tabelle 81. Atomabstände/Å von $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Eu1	O225	2,364(8)	O213	C13	1,288(11)
Eu1	O101	2,374(7)	O223	C23	1,304(12)
Eu1	O10	2,393(7)	O223	Eu1	2,421(8)
Eu1	O223	2,421(8)	O111	C11	1,278(11)
Eu1	O121	2,422(8)	O111	Eu2	2,398(8)
Eu1	O211	2,476(7)	O225	C25	1,261(12)
Eu1	O213	2,500(8)	O225	Eu1	2,364(8)
Eu1	O113	2,522(8)	O201	C1	1,293(12)
Eu1	O111	2,599(8)	O121	C21	1,294(11)
Eu1	C13	2,876(10)	O211	C11	1,250(12)
Eu1	C11	2,912(9)	O101	C1	1,258(11)
Eu1	Eu2	4,0159(9)	O123	C23	1,227(13)
Eu2	O201	2,296(8)	O125	C25	1,258(13)
Eu2	O125	2,323(8)	C1	C2	1,472(14)

Eu2	O213	2,337(8)	O113	C13	1,231(13)
Eu2	O111	2,398(8)	O221	C21	1,245(13)
Eu2	O123	2,440(8)	C2	O12	1,872(18)
Eu2	O221	2,448(8)	C22	C21	1,513(16)
Eu2	O223	2,516(8)	C25	C26	1,529(14)
Eu2	O121	2,569(9)	C14	C13	1,516(14)
Eu2	C23	2,856(9)	C11	C12	1,522(14)
Eu2	C21	2,880(10)	C23	C24	1,494(13)
Eu2	Eu1	4,0496(9)			

Tabelle 82. Winkel/° von Eu(OAc)₃(H₂O)_{1,5}.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O225	Eu1	O101	138,6(3)	O221	Eu2	O121	52,0(3)
O225	Eu1	O10	141,3(3)	O223	Eu2	O121	126,8(2)
O101	Eu1	O10	71,0(2)	O201	Eu2	C23	171,8(3)
O225	Eu1	O223	76,2(3)	O125	Eu2	C23	89,0(3)
O101	Eu1	O223	145,0(3)	O213	Eu2	C23	104,6(3)
O10	Eu1	O223	76,5(3)	O111	Eu2	C23	94,2(3)
O225	Eu1	O121	72,5(3)	O123	Eu2	C23	25,3(3)
O101	Eu1	O121	73,2(2)	O221	Eu2	C23	76,1(3)
O10	Eu1	O121	144,0(3)	O223	Eu2	C23	27,2(3)
O223	Eu1	O121	136,4(3)	O121	Eu2	C23	110,7(3)
O225	Eu1	O211	128,0(3)	O201	Eu2	C21	91,8(3)
O101	Eu1	O211	73,1(2)	O125	Eu2	C21	173,1(3)
O10	Eu1	O211	77,2(2)	O213	Eu2	C21	92,2(3)
O223	Eu1	O211	87,4(3)	O111	Eu2	C21	98,3(3)
O121	Eu1	O211	88,6(3)	O123	Eu2	C21	86,4(3)
O225	Eu1	O213	71,7(3)	O221	Eu2	C21	25,4(3)
O101	Eu1	O213	75,0(3)	O223	Eu2	C21	101,7(3)
O10	Eu1	O213	104,7(3)	O121	Eu2	C21	26,7(2)
O223	Eu1	O213	127,0(3)	C23	Eu2	C21	92,0(3)
O121	Eu1	O213	69,4(3)	O201	Eu2	Eu1	70,6(2)
O211	Eu1	O213	145,4(2)	O125	Eu2	Eu1	113,1(2)
O225	Eu1	O113	73,5(3)	O213	Eu2	Eu1	35,19(18)
O101	Eu1	O113	103,6(3)	O111	Eu2	Eu1	140,74(18)
O10	Eu1	O113	75,0(2)	O123	Eu2	Eu1	93,51(19)
O223	Eu1	O113	79,8(3)	O221	Eu2	Eu1	85,7(2)
O121	Eu1	O113	118,1(3)	O223	Eu2	Eu1	144,04(18)
O211	Eu1	O113	151,5(2)	O121	Eu2	Eu1	35,19(17)
O213	Eu1	O113	51,3(2)	C23	Eu2	Eu1	117,5(2)
O225	Eu1	O111	77,3(2)	C21	Eu2	Eu1	60,53(19)
O101	Eu1	O111	116,9(2)	O201	Eu2	Eu1	110,7(2)
O10	Eu1	O111	115,2(3)	O125	Eu2	Eu1	71,8(2)
O223	Eu1	O111	66,2(3)	O213	Eu2	Eu1	148,98(18)
O121	Eu1	O111	77,8(3)	O111	Eu2	Eu1	37,56(18)
O211	Eu1	O111	51,2(2)	O123	Eu2	Eu1	85,75(19)
O213	Eu1	O111	140,1(3)	O221	Eu2	Eu1	89,3(2)
O113	Eu1	O111	139,5(2)	O223	Eu2	Eu1	34,13(18)
O225	Eu1	C13	67,0(3)	O121	Eu2	Eu1	139,97(17)
O101	Eu1	C13	92,6(3)	C23	Eu2	Eu1	61,1(2)

O10	Eu1	C13	92,4(3)	C21	Eu2	Eu1	114,50(19)
O223	Eu1	C13	101,7(3)	Eu1	Eu2	Eu1	175,021(15)
O121	Eu1	C13	93,3(3)	C13	O213	Eu2	149,9(7)
O211	Eu1	C13	164,4(2)	C13	O213	Eu1	93,3(6)
O213	Eu1	C13	26,5(2)	Eu2	O213	Eu1	112,2(3)
O113	Eu1	C13	25,3(3)	C23	O223	Eu1	157,4(7)
O111	Eu1	C13	144,2(2)	C23	O223	Eu2	91,1(6)
O225	Eu1	C11	102,9(3)	Eu1	O223	Eu2	110,2(3)
O101	Eu1	C11	94,1(3)	C11	O111	Eu2	128,7(7)
O10	Eu1	C11	97,1(3)	C11	O111	Eu1	90,8(6)
O223	Eu1	C11	76,9(3)	Eu2	O111	Eu1	108,2(3)
O121	Eu1	C11	81,3(3)	C25	O225	Eu1	148,3(7)
O211	Eu1	C11	25,2(2)	C1	O201	Eu2	136,6(7)
O213	Eu1	C11	150,6(3)	C21	O121	Eu1	151,4(7)
O113	Eu1	C11	156,7(3)	C21	O121	Eu2	90,2(6)
O111	Eu1	C11	26,0(2)	Eu1	O121	Eu2	107,1(3)
C13	Eu1	C11	169,7(3)	C11	O211	Eu1	97,3(6)
O225	Eu1	Eu2	73,9(2)	C1	O101	Eu1	144,0(6)
O101	Eu1	Eu2	64,75(18)	C23	O123	Eu2	96,7(6)
O10	Eu1	Eu2	124,07(19)	C25	O125	Eu2	132,6(7)
O223	Eu1	Eu2	148,94(19)	O101	C1	O201	123,3(9)
O121	Eu1	Eu2	37,7(2)	O101	C1	C2	119,6(9)
O211	Eu1	Eu2	117,96(18)	O201	C1	C2	117,0(9)
O213	Eu1	Eu2	32,60(17)	C13	O113	Eu1	93,7(6)
O113	Eu1	Eu2	83,69(17)	C21	O221	Eu2	97,1(6)
O111	Eu1	Eu2	114,47(19)	C1	C2	O12	159,1(11)
C13	Eu1	Eu2	58,49(19)	O125	C25	O225	124,5(10)
C11	Eu1	Eu2	118,0(2)	O125	C25	C26	114,9(9)
O201	Eu2	O125	88,1(3)	O225	C25	C26	120,6(10)
O201	Eu2	O213	82,5(3)	O113	C13	O213	119,5(9)
O125	Eu2	O213	81,0(3)	O113	C13	C14	123,1(9)
O201	Eu2	O111	78,0(3)	O213	C13	C14	117,4(9)
O125	Eu2	O111	88,4(3)	O113	C13	Eu1	61,0(5)
O213	Eu2	O111	158,1(3)	O213	C13	Eu1	60,2(5)
O201	Eu2	O123	162,6(3)	C14	C13	Eu1	164,7(8)
O125	Eu2	O123	91,6(3)	O211	C11	O111	120,5(8)
O213	Eu2	O123	80,2(3)	O211	C11	C12	121,2(9)
O111	Eu2	O123	119,4(3)	O111	C11	C12	118,3(9)
O201	Eu2	O221	104,8(3)	O211	C11	Eu1	57,5(5)
O125	Eu2	O221	160,2(3)	O111	C11	Eu1	63,2(5)
O213	Eu2	O221	115,1(3)	C12	C11	Eu1	175,4(8)
O111	Eu2	O221	79,9(3)	O123	C23	O223	119,1(9)
O123	Eu2	O221	80,5(3)	O123	C23	C24	123,8(10)
O201	Eu2	O223	144,7(3)	O223	C23	C24	117,1(9)
O125	Eu2	O223	82,1(3)	O123	C23	Eu2	58,1(5)
O213	Eu2	O223	128,7(3)	O223	C23	Eu2	61,7(5)
O111	Eu2	O223	67,9(3)	C24	C23	Eu2	170,5(8)
O123	Eu2	O223	52,2(3)	O221	C21	O121	120,3(10)
O221	Eu2	O223	78,7(3)	O221	C21	C22	120,2(9)
O201	Eu2	O121	75,4(3)	O121	C21	C22	119,5(10)
O125	Eu2	O121	147,6(3)	O221	C21	Eu2	57,5(5)
O213	Eu2	O121	69,5(2)	O121	C21	Eu2	63,1(6)
O111	Eu2	O121	114,4(3)	C22	C21	Eu2	173,6(10)
O123	Eu2	O121	96,1(3)				

8.3 Acetat-Essigsäure-Addukte

8.3.1 Neodymacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$

Tabelle 83. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$.

Atom	x	y	z	Ueq
Nd	0,78043(3)	0,07908(2)	1,013981(19)	0,01906(12)
O2	1,0071(6)	0,3286(4)	1,0626(4)	0,0337(8)
C3	0,3272(10)	0,1420(9)	0,7294(6)	0,0543(18)
HA	0,2103	0,0786	0,7242	0,178(19)
HB	0,3565	0,1077	0,6546	0,178(19)
HC	0,3184	0,2429	0,7401	0,178(19)
O4	1,0978(5)	0,1410(3)	0,9749(3)	0,0284(7)
O5	0,4349(5)	0,0526(4)	0,9033(3)	0,0273(7)
O6	0,6408(6)	0,2099(4)	0,8630(4)	0,0373(9)
O7	0,9649(6)	0,4071(5)	0,7840(4)	0,0432(10)
H7	0,9605	0,4857	0,8282	0,07(3)
O8	0,9849(5)	-0,1281(4)	0,7801(3)	0,0321(8)
C9	0,8121(9)	0,3533(7)	0,6861(6)	0,0394(13)
C10	0,8154(8)	-0,1312(5)	0,7388(4)	0,0275(10)
C11	0,4775(7)	0,1371(5)	0,8372(4)	0,0258(9)
O12	0,7004(6)	0,2754(4)	1,1632(4)	0,0367(9)
O13	0,7255(6)	-0,0773(4)	0,8030(4)	0,0367(9)
C14	0,8025(13)	0,2006(8)	0,6112(7)	0,062(2)
H1A	0,9103	0,1715	0,6487	0,178(19)
H1B	0,799	0,2019	0,5288	0,178(19)
H1C	0,692	0,1305	0,6079	0,178(19)
C15	0,7175(11)	-0,2090(8)	0,6025(5)	0,0531(18)
H1D	0,8038	-0,2448	0,565	0,178(19)
H1E	0,6708	-0,1399	0,5635	0,178(19)
H1F	0,6155	-0,292	0,5924	0,178(19)
O16	0,6976(9)	0,4191(7)	0,6624(6)	0,0668(16)
O17	0,8795(9)	0,3029(7)	1,3526(4)	0,0667(17)
H17	0,9262	0,2461	1,3142	0,10(4)
C18	0,7508(9)	0,3357(6)	1,2748(5)	0,0362(12)
C19	0,6734(13)	0,4544(9)	1,3343(8)	0,061(2)
H1G	0,7325	0,4858	1,4223	0,178(19)
H1H	0,5415	0,4151	1,316	0,178(19)
H1I	0,6967	0,5383	1,3029	0,178(19)
C20	1,1261(7)	0,2822(5)	1,0216(4)	0,0245(9)
C21	1,2991(8)	0,3888(6)	1,0249(6)	0,0396(13)
H2A	1,3742	0,3338	0,9897	0,178(19)
H2B	1,3684	0,4458	1,1091	0,178(19)
H2C	1,2659	0,4554	0,9781	0,178(19)

Tabelle 84. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Nd	0,01429(17)	0,02012(15)	0,02240(16)	0,00398(9)	0,00704(9)	0,00490(9)
O2	0,029(2)	0,0250(16)	0,045(2)	0,0025(14)	0,0173(16)	0,0068(14)
C3	0,045(4)	0,073(5)	0,043(3)	0,035(3)	-0,001(3)	0,013(3)
O4	0,030(2)	0,0224(15)	0,0360(18)	0,0077(13)	0,0154(15)	0,0084(13)
O5	0,0217(19)	0,0346(17)	0,0305(17)	0,0151(14)	0,0111(13)	0,0082(13)
O6	0,028(2)	0,040(2)	0,045(2)	0,0230(17)	0,0098(17)	0,0041(15)
O7	0,036(2)	0,037(2)	0,048(2)	0,0005(18)	0,0087(18)	0,0117(17)
O8	0,025(2)	0,0422(19)	0,0270(17)	0,0047(14)	0,0067(14)	0,0141(15)
C9	0,039(4)	0,043(3)	0,041(3)	0,016(2)	0,016(2)	0,012(2)
C10	0,032(3)	0,029(2)	0,019(2)	0,0023(17)	0,0054(18)	0,0110(19)
C11	0,028(3)	0,026(2)	0,027(2)	0,0104(17)	0,0119(19)	0,0092(18)
O12	0,035(2)	0,0360(19)	0,040(2)	0,0042(15)	0,0147(17)	0,0149(16)
O13	0,030(2)	0,043(2)	0,0322(19)	-0,0010(15)	0,0070(15)	0,0165(16)
C14	0,066(5)	0,052(4)	0,052(4)	-0,001(3)	0,007(4)	0,016(3)
C15	0,048(4)	0,069(4)	0,026(3)	-0,007(3)	0,000(3)	0,021(3)
O16	0,065(4)	0,074(4)	0,066(3)	0,024(3)	0,010(3)	0,040(3)
O17	0,082(5)	0,093(4)	0,036(2)	0,006(2)	0,020(2)	0,060(3)
C18	0,038(3)	0,036(3)	0,038(3)	0,002(2)	0,021(2)	0,016(2)
C19	0,068(6)	0,056(4)	0,066(5)	-0,001(3)	0,032(4)	0,038(4)
C20	0,021(2)	0,0205(19)	0,028(2)	0,0068(16)	0,0055(17)	0,0026(16)
C21	0,027(3)	0,029(2)	0,061(4)	0,011(2)	0,017(3)	0,002(2)

Tabelle 85. Atomabstände/Å von $\text{Nd}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Nd	O5	2,413(3)	O4	Nd	2,480(3)
Nd	O13	2,454(4)	O5	C11	1,291(6)
Nd	O4	2,480(3)	O5	Nd	2,413(3)
Nd	O8	2,494(4)	O6	C11	1,233(6)
Nd	O2	2,504(4)	O7	C9	1,329(8)
Nd	O6	2,533(4)	O8	C10	1,264(7)
Nd	O12	2,537(4)	O8	Nd	2,494(4)
Nd	O5	2,581(4)	C9	O16	1,193(8)
Nd	O4	2,581(4)	C9	C14	1,494(9)
Nd	C11	2,935(5)	C10	O13	1,240(6)
Nd	C20	2,936(5)	C10	C15	1,512(7)
Nd	Nd	4,0236(8)	O12	C18	1,223(7)
O2	C20	1,246(6)	O17	C18	1,306(8)
C3	C11	1,497(8)	C18	C19	1,496(8)
O4	C20	1,283(5)	C20	C21	1,495(7)

Tabelle 86. Winkel/° von Nd(OAc)₃(HOAc).

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O5	Nd	O13	106,93(14)	O2	Nd	C20	24,88(13)
O5	Nd	O4	79,59(12)	O6	Nd	C20	81,22(13)
O13	Nd	O4	71,09(13)	O12	Nd	C20	94,55(14)
O5	Nd	O8	85,15(13)	O5	Nd	C20	131,54(12)
O13	Nd	O8	135,29(12)	O4	Nd	C20	25,89(12)
O4	Nd	O8	69,12(12)	C11	Nd	C20	105,90(14)
O5	Nd	O2	140,78(12)	O5	Nd	Nd	117,09(9)
O13	Nd	O2	111,75(14)	O13	Nd	Nd	68,50(10)
O4	Nd	O2	118,81(13)	O4	Nd	Nd	38,23(9)
O8	Nd	O2	72,11(14)	O8	Nd	Nd	67,77(9)
O5	Nd	O6	115,38(13)	O2	Nd	Nd	83,76(9)
O13	Nd	O6	71,48(14)	O6	Nd	Nd	120,62(10)
O4	Nd	O6	142,35(13)	O12	Nd	Nd	139,21(10)
O8	Nd	O6	142,20(13)	O5	Nd	Nd	144,04(8)
O2	Nd	O6	72,49(13)	O4	Nd	Nd	36,48(7)
O5	Nd	O12	72,93(13)	C11	Nd	Nd	134,07(10)
O13	Nd	O12	150,24(14)	C20	Nd	Nd	60,16(9)
O4	Nd	O12	135,63(13)	C20	O2	Nd	97,3(3)
O8	Nd	O12	74,38(13)	C20	O4	Nd	145,6(3)
O2	Nd	O12	70,41(13)	C20	O4	Nd	92,7(3)
O6	Nd	O12	81,68(14)	Nd	O4	Nd	105,29(12)
O5	Nd	O5	66,03(13)	C11	O5	Nd	152,8(3)
O13	Nd	O5	76,34(13)	C11	O5	Nd	92,5(3)
O4	Nd	O5	122,24(12)	Nd	O5	Nd	113,97(13)
O8	Nd	O5	144,01(12)	C11	O6	Nd	96,2(3)
O2	Nd	O5	117,14(12)	C10	O8	Nd	137,3(3)
O6	Nd	O5	50,50(12)	O16	C9	O7	123,8(6)
O12	Nd	O5	76,75(13)	O16	C9	C14	124,9(7)
O5	Nd	O4	152,07(12)	O7	C9	C14	111,3(6)
O13	Nd	O4	74,93(13)	O13	C10	O8	124,3(4)
O4	Nd	O4	74,71(12)	O13	C10	C15	118,8(5)
O8	Nd	O4	75,68(13)	O8	C10	C15	116,9(5)
O2	Nd	O4	50,77(11)	O6	C11	O5	119,5(5)
O6	Nd	O4	91,90(13)	O6	C11	C3	121,6(5)
O12	Nd	O4	119,57(12)	O5	C11	C3	118,9(5)
O5	Nd	O4	138,52(11)	O6	C11	Nd	59,1(3)
O5	Nd	C11	91,95(13)	O5	C11	Nd	61,5(3)
O13	Nd	C11	69,34(13)	C3	C11	Nd	168,9(4)
O4	Nd	C11	134,90(12)	C18	O12	Nd	137,4(4)
O8	Nd	C11	154,86(12)	C10	O13	Nd	138,9(3)
O2	Nd	C11	95,56(13)	O12	C18	O17	122,5(5)
O6	Nd	C11	24,70(13)	O12	C18	C19	123,4(6)
O12	Nd	C11	80,90(13)	O17	C18	C19	114,0(6)
O5	Nd	C11	26,08(12)	O2	C20	O4	119,2(4)
O4	Nd	C11	113,94(13)	O2	C20	C21	120,9(4)
O5	Nd	C20	156,50(13)	O4	C20	C21	119,9(5)
O13	Nd	C20	93,83(14)	O2	C20	Nd	57,8(2)
O4	Nd	C20	97,41(13)	O4	C20	Nd	61,4(2)
O8	Nd	C20	72,17(14)	C21	C20	Nd	178,4(4)

8.3.2 Samariumacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$ **Tabelle 87.** Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$.

Atom	x	y	z	Ueq
Sm	0,73771(4)	0,92211(3)	0,01208(3)	0,02409(9)
O2	0,6036(5)	1,0871(4)	0,1678(4)	0,0326(10)
O3	0,7728(5)	0,8160(4)	0,2019(4)	0,0336(10)
O4	0,3144(5)	1,1502(4)	0,1716(4)	0,0334(10)
O5	0,9687(5)	0,7269(4)	-0,0588(4)	0,0330(10)
O6	0,6045(5)	1,1234(4)	-0,0688(3)	0,0265(9)
O7	0,5806(5)	0,6858(4)	0,0531(4)	0,0380(11)
O8	0,9719(6)	0,6856(5)	-0,2429(4)	0,0442(11)
H8	0,8754	0,7329	-0,2248	0,10(3)
O9	1,0109(5)	1,0309(4)	-0,1139(4)	0,0298(9)
C10	0,4191(7)	0,7355(6)	0,0773(5)	0,0300(13)
C11	1,0351(8)	0,6661(6)	-0,1518(6)	0,0347(15)
C12	1,1942(8)	0,5611(7)	-0,1695(7)	0,0458(17)
H12A	1,2254	0,5267	-0,2477	0,148(14)
H12B	1,1606	0,4797	-0,116	0,148(14)
H12C	1,2984	0,6095	-0,1559	0,148(14)
C13	0,4146(9)	1,1899(8)	0,3407(6)	0,0490(18)
H13A	0,2902	1,2257	0,3677	0,148(14)
H13B	0,4988	1,2668	0,3428	0,148(14)
H13C	0,4329	1,1099	0,39	0,148(14)
C14	0,4486(8)	1,1388(6)	0,2187(6)	0,0323(14)
C15	0,9034(7)	0,8979(7)	0,2071(6)	0,0338(14)
C16	0,2565(9)	0,6393(7)	0,1193(8)	0,0421(18)
C17	0,9523(10)	0,9196(9)	0,3185(6)	0,0532(19)
H17A	1,0544	0,9853	0,3053	0,148(14)
H17B	0,9859	0,8273	0,3471	0,148(14)
H17C	0,8482	0,96	0,3747	0,148(14)
O18	0,5304(9)	0,6553(7)	0,3602(7)	0,089(2)
O19	0,3429(8)	0,8375(8)	0,4001(9)	0,120(3)
C20	0,2325(13)	0,6055(11)	0,4788(9)	0,085(3)
H20A	0,2868	0,5096	0,4751	0,148(14)
H20B	0,1283	0,604	0,447	0,148(14)
H20C	0,1929	0,6349	0,5584	0,148(14)
C21	0,3719(10)	0,7113(8)	0,4101(7)	0,0508(18)
H22	0,598(12)	0,726(10)	0,305(9)	0,09(3)
H23	0,150(9)	0,661(7)	0,090(6)	0,043(18)
H24	0,286(9)	0,544(8)	0,106(6)	0,044(19)
H27	0,221(11)	0,651(9)	0,202(8)	0,08(3)

Tabelle 88. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Sm	0,01512(12)	0,02103(13)	0,03582(18)	-0,00019(10)	-0,00656(11)	0,00250(9)
O2	0,0239(18)	0,037(2)	0,039(3)	-0,0089(19)	-0,0112(19)	0,0078(17)
O3	0,0262(18)	0,031(2)	0,041(3)	0,0076(19)	-0,0055(19)	-0,0054(17)
O4	0,0246(18)	0,036(2)	0,041(3)	-0,0081(19)	-0,0114(19)	0,0089(17)
O5	0,0209(17)	0,029(2)	0,046(3)	0,000(2)	-0,0036(19)	0,0061(16)
O6	0,0249(17)	0,0188(18)	0,036(2)	0,0003(17)	-0,0087(18)	0,0037(15)
O7	0,0231(18)	0,023(2)	0,068(3)	0,002(2)	-0,014(2)	0,0003(16)
O8	0,042(2)	0,047(3)	0,041(3)	-0,007(2)	-0,007(2)	0,019(2)
O9	0,0183(16)	0,035(2)	0,033(2)	0,0066(19)	-0,0017(18)	0,0001(16)
C10	0,024(2)	0,030(3)	0,038(4)	0,002(3)	-0,011(3)	-0,001(2)
C11	0,027(3)	0,022(3)	0,050(5)	0,000(3)	-0,003(3)	0,004(2)
C12	0,036(3)	0,040(4)	0,054(5)	-0,007(3)	0,000(3)	0,018(3)
C13	0,050(4)	0,055(4)	0,046(5)	-0,020(4)	-0,018(4)	0,012(3)
C14	0,031(3)	0,024(3)	0,045(4)	-0,002(3)	-0,015(3)	0,002(2)
C15	0,025(3)	0,039(3)	0,035(4)	0,009(3)	-0,006(3)	0,007(3)
C16	0,031(3)	0,029(3)	0,067(6)	0,009(4)	-0,016(4)	-0,008(3)
C17	0,055(4)	0,071(5)	0,038(4)	0,009(4)	-0,019(4)	-0,012(4)
O18	0,078(4)	0,049(3)	0,100(6)	0,015(4)	0,044(4)	0,012(3)
O19	0,054(3)	0,085(5)	0,200(9)	0,043(6)	-0,001(5)	0,013(4)
C20	0,078(6)	0,093(8)	0,061(6)	0,017(6)	0,021(5)	-0,017(6)
C21	0,046(4)	0,050(4)	0,056(5)	0,001(4)	-0,013(4)	0,000(3)

Tabelle 89. Atomabstände/Å von $\text{Sm}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Sm	O6	2,392(3)	O5	C11	1,231(8)
Sm	O9	2,409(4)	O6	C10	1,307(6)
Sm	O2	2,416(4)	O6	Sm	2,520(3)
Sm	O4	2,439(4)	O7	C10	1,254(6)
Sm	O7	2,455(4)	O8	C11	1,309(8)
Sm	O5	2,475(4)	O9	C15	1,292(7)
Sm	O6	2,520(3)	O9	Sm	2,559(4)
Sm	O3	2,524(4)	C10	O6	1,307(6)
Sm	O9	2,559(4)	C10	C16	1,485(8)
Sm	C10	2,886(6)	C11	C12	1,499(7)
Sm	C15	2,929(6)	C13	C14	1,496(9)
Sm	Sm	3,9166(8)	C15	O9	1,292(7)
O2	C14	1,253(7)	C15	C17	1,492(9)
O3	C15	1,262(7)	O18	C21	1,287(9)
O4	C14	1,285(6)	O19	C21	1,182(9)
O4	Sm	2,439(4)	C20	C21	1,497(12)

Tabelle 90. Winkel/° von Sm(OAc)₃(HOAc).

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O6	Sm	O9	79,55(12)	O7	Sm	C15	94,76(16)
O6	Sm	O2	72,30(13)	O5	Sm	C15	79,89(15)
O9	Sm	O2	109,13(14)	O6	Sm	C15	113,72(15)
O6	Sm	O4	70,87(13)	O3	Sm	C15	25,39(14)
O9	Sm	O4	82,97(14)	O9	Sm	C15	26,14(14)
O2	Sm	O4	138,15(11)	C10	Sm	C15	104,92(17)
O6	Sm	O7	120,97(12)	O6	Sm	Sm	38,28(9)
O9	Sm	O7	140,49(14)	O9	Sm	Sm	117,02(8)
O2	Sm	O7	109,33(15)	O2	Sm	Sm	68,50(8)
O4	Sm	O7	74,49(15)	O4	Sm	Sm	70,37(8)
O6	Sm	O5	137,57(14)	O7	Sm	Sm	85,53(8)
O9	Sm	O5	71,30(12)	O5	Sm	Sm	143,00(9)
O2	Sm	O5	146,27(13)	O6	Sm	Sm	36,01(8)
O4	Sm	O5	75,46(13)	O3	Sm	Sm	120,83(9)
O7	Sm	O5	71,85(12)	O9	Sm	Sm	141,04(9)
O6	Sm	O6	74,29(14)	C10	Sm	Sm	61,19(10)
O9	Sm	O6	151,43(12)	C15	Sm	Sm	132,15(11)
O2	Sm	O6	73,68(12)	C14	O2	Sm	138,9(4)
O4	Sm	O6	77,82(13)	C15	O3	Sm	95,5(3)
O7	Sm	O6	52,44(11)	C14	O4	Sm	135,5(4)
O5	Sm	O6	122,72(12)	C11	O5	Sm	136,2(4)
O6	Sm	O3	142,49(13)	C10	O6	Sm	148,7(3)
O9	Sm	O3	115,50(12)	C10	O6	Sm	92,4(3)
O2	Sm	O3	70,29(13)	Sm	O6	Sm	105,71(14)
O4	Sm	O3	141,49(13)	C10	O7	Sm	96,8(3)
O7	Sm	O3	70,31(14)	C15	O9	Sm	152,0(3)
O5	Sm	O3	79,16(13)	C15	O9	Sm	93,1(3)
O6	Sm	O3	92,49(12)	Sm	O9	Sm	113,48(16)
O6	Sm	O9	119,58(12)	O7	C10	O6	118,4(5)
O9	Sm	O9	66,52(16)	O7	C10	C16	121,8(5)
O2	Sm	O9	73,87(12)	O6	C10	C16	119,8(5)
O4	Sm	O9	143,44(12)	O7	C10	Sm	57,6(3)
O7	Sm	O9	116,88(13)	O6	C10	Sm	60,8(3)
O5	Sm	O9	75,96(13)	C16	C10	Sm	176,0(5)
O6	Sm	O9	137,73(13)	O5	C11	O8	123,2(5)
O3	Sm	O9	51,04(12)	O5	C11	C12	122,5(6)
O6	Sm	C10	98,66(13)	O8	C11	C12	114,2(6)
O9	Sm	C10	157,16(16)	O2	C14	O4	123,4(6)
O2	Sm	C10	91,66(15)	O2	C14	C13	119,3(5)
O4	Sm	C10	75,05(16)	O4	C14	C13	117,3(5)
O7	Sm	C10	25,56(13)	O3	C15	O9	118,1(5)
O5	Sm	C10	96,81(14)	O3	C15	C17	121,6(6)
O6	Sm	C10	26,89(12)	O9	C15	C17	120,3(6)
O3	Sm	C10	79,79(14)	O3	C15	Sm	59,1(3)
O9	Sm	C10	130,84(14)	O9	C15	Sm	60,7(3)
O6	Sm	C15	132,44(15)	C17	C15	Sm	164,2(4)
O9	Sm	C15	92,38(15)	O19	C21	O18	120,8(8)
O2	Sm	C15	66,39(14)	O19	C21	C20	124,1(8)
O4	Sm	C15	155,12(14)	O18	C21	C20	115,1(7)

8.3.3 Dysprosiumacetat-Essigsäure-Addukt, $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_3(\text{H}_2\text{O})$ **Tabelle 91.** Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_3(\text{H}_2\text{O})$.

Atom	x	y	z	Ueq
Dy	0,77556(3)	0,506227(10)	0,39279(2)	0,03870(9)
O121	0,9693(4)	0,48498(17)	0,6136(4)	0,0455(9)
O221	0,7155(5)	0,4733(2)	0,5731(4)	0,0517(10)
O141	0,5389(5)	0,44026(18)	0,3224(4)	0,0550(11)
O131	0,8698(5)	0,60164(17)	0,4952(4)	0,0499(10)
O231	1,1303(5)	0,59949(17)	0,5969(4)	0,0491(10)
O100	0,5495(5)	0,5659(2)	0,3803(6)	0,0634(13)
H7	0,5672	0,6032	0,3729	0,16(3)
O111	0,7324(6)	0,5831(2)	0,2272(4)	0,0634(12)
O211	0,7213(6)	0,4850(2)	0,1739(4)	0,0629(12)
O251	0,6879(10)	0,7057(3)	0,2296(7)	0,099(2)
H10	0,6743	0,6675	0,2216	0,16(3)
C31	0,9970(8)	0,6271(3)	0,5585(6)	0,0463(14)
O241	0,6038(6)	0,3396(2)	0,3380(7)	0,0901(19)
H12	0,6939	0,3541	0,3656	0,16(3)
C21	0,8546(7)	0,4754(2)	0,6521(6)	0,0436(13)
C22	0,8836(9)	0,4666(4)	0,7860(6)	0,0662(19)
H1A	0,9956	0,4693	0,8312	0,183(13)
H1B	0,845	0,4261	0,7992	0,183(13)
H1C	0,829	0,4989	0,8139	0,183(13)
C41	0,5008(8)	0,3851(3)	0,3194(6)	0,0519(15)
C51	0,6113(12)	0,7276(4)	0,2985(9)	0,081(2)
O151	0,5511(9)	0,6956(3)	0,3550(7)	0,103(2)
O161	0,2811(14)	0,6293(5)	-0,0810(11)	0,175(5)
C42	0,3344(8)	0,3641(3)	0,2946(8)	0,0677(19)
H1D	0,3306	0,3189	0,2946	0,183(13)
H1E	0,2677	0,3796	0,2158	0,183(13)
H1F	0,2974	0,3801	0,3576	0,183(13)
O261	0,055(2)	0,6194(9)	-0,0634(14)	0,212(6)
H20	0,0078	0,6087	-0,135	0,16(3)
C32	0,9923(9)	0,6958(3)	0,5909(7)	0,0652(19)
H2A	1,0973	0,7096	0,6396	0,183(13)
H2B	0,9223	0,7013	0,6369	0,183(13)
H2C	0,9545	0,7203	0,5166	0,183(13)
C11	0,7114(8)	0,5424(4)	0,1432(6)	0,0578(17)
C52	0,6160(15)	0,7985(4)	0,3028(11)	0,116(4)
H2D	0,6733	0,8139	0,2521	0,183(13)
H2E	0,6682	0,8122	0,3863	0,183(13)
H2F	0,5095	0,8148	0,2729	0,183(13)
C12	0,6817(11)	0,5620(5)	0,0129(7)	0,087(3)
H2G	0,6683	0,5253	-0,0381	0,183(13)
H2H	0,7706	0,586	0,009	0,183(13)
H2I	0,5873	0,5873	-0,0158	0,183(13)
C61	0,174(3)	0,6527(7)	-0,0580(14)	0,138(5)
C62	0,162(3)	0,7196(7)	-0,0336(14)	0,214(10)
H2J	0,0645	0,7273	-0,0182	0,183(13)
H2K	0,1619	0,7437	-0,1037	0,183(13)
H2L	0,2502	0,7319	0,0373	0,183(13)
H27	0,4894	0,5595	0,419	0,16(5)

Tabelle 92. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_3(\text{H}_2\text{O})$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Dy	0,03421(13)	0,03632(13)	0,04822(14)	-0,00034(14)	0,01763(9)	-0,00168(13)
O121	0,0373(19)	0,049(2)	0,057(2)	0,0000(18)	0,0255(18)	-0,0051(17)
O221	0,037(2)	0,069(3)	0,054(3)	0,0071(18)	0,023(2)	-0,0025(19)
O141	0,044(3)	0,046(2)	0,073(3)	-0,003(2)	0,019(2)	-0,0083(18)
O131	0,041(2)	0,039(2)	0,067(3)	-0,0094(18)	0,014(2)	-0,0017(17)
O231	0,039(2)	0,0377(19)	0,071(3)	-0,0044(18)	0,019(2)	0,0009(16)
O100	0,045(3)	0,049(2)	0,109(4)	0,010(2)	0,044(3)	0,0052(19)
O111	0,082(4)	0,060(3)	0,054(3)	0,008(2)	0,032(3)	0,013(2)
O211	0,073(3)	0,065(3)	0,050(2)	-0,009(2)	0,020(2)	-0,009(2)
O251	0,153(7)	0,055(3)	0,116(5)	0,013(3)	0,081(5)	0,012(4)
C31	0,046(4)	0,040(3)	0,058(4)	-0,001(3)	0,025(3)	-0,002(3)
O241	0,048(3)	0,052(3)	0,164(6)	0,000(3)	0,029(4)	-0,008(2)
C21	0,045(3)	0,037(3)	0,056(4)	-0,001(2)	0,027(3)	-0,003(2)
C22	0,063(5)	0,085(5)	0,057(4)	0,007(4)	0,029(4)	-0,001(4)
C41	0,048(4)	0,049(4)	0,059(4)	-0,003(3)	0,019(3)	-0,005(3)
C51	0,093(7)	0,058(4)	0,099(7)	0,014(4)	0,042(5)	0,011(4)
O151	0,119(6)	0,062(3)	0,162(7)	0,023(4)	0,093(5)	0,018(3)
O161	0,165(10)	0,181(9)	0,201(11)	-0,089(8)	0,092(9)	-0,023(8)
C42	0,049(4)	0,065(4)	0,089(5)	-0,003(4)	0,024(4)	-0,017(3)
O261	0,187(14)	0,234(15)	0,198(13)	-0,010(13)	0,043(12)	-0,005(11)
C32	0,061(4)	0,038(3)	0,094(6)	-0,018(3)	0,024(4)	0,003(3)
C11	0,046(4)	0,076(5)	0,053(4)	0,003(3)	0,019(3)	-0,007(3)
C52	0,163(11)	0,059(5)	0,163(11)	0,009(6)	0,102(9)	0,003(6)
C12	0,080(6)	0,128(7)	0,051(5)	0,016(5)	0,021(4)	-0,004(5)
C61	0,185(18)	0,124(11)	0,113(10)	-0,019(8)	0,063(12)	0,001(11)
C62	0,37(3)	0,141(12)	0,170(15)	-0,066(11)	0,147(19)	0,001(15)

Tabelle 93. Atomabstände/Å von $\text{Dy}(\text{OAc})_3(\text{HOAc})_3(\text{H}_2\text{O})$.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Dy	O121	2,322(3)	O131	C31	1,247(7)
Dy	O131	2,351(4)	O231	C31	1,266(7)
Dy	O100	2,352(4)	O231	Dy	2,387(4)
Dy	O231	2,387(4)	O111	C11	1,265(8)
Dy	O221	2,428(4)	O211	C11	1,263(8)
Dy	O141	2,436(4)	O251	C51	1,304(11)
Dy	O111	2,443(4)	C31	C32	1,511(8)
Dy	O211	2,447(4)	O241	C41	1,302(8)
Dy	O121	2,584(4)	C21	C22	1,490(9)
Dy	C11	2,846(7)	C41	C42	1,488(9)
Dy	C21	2,907(6)	C51	O151	1,193(10)
Dy	Dy	3,9406(8)	C51	C52	1,507(11)
O121	C21	1,269(6)	O161	C61	1,192(19)
O121	Dy	2,322(3)	O261	C61	1,263(18)
O221	C21	1,267(7)	C11	C12	1,495(10)
O141	C41	1,216(7)	C61	C62	1,461(18)

Tabelle 94. Winkel/° von Dy(OAc)₃(HOAc)₃(H₂O).

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O121	Dy	O131	76,12(14)	O141	Dy	C21	95,13(16)
O121	Dy	O100	142,43(14)	O111	Dy	C21	151,04(15)
O131	Dy	O100	73,70(16)	O211	Dy	C21	156,22(15)
O121	Dy	O231	75,04(13)	O121	Dy	C21	25,88(14)
O131	Dy	O231	136,53(14)	C11	Dy	C21	176,62(18)
O100	Dy	O231	142,37(15)	O121	Dy	Dy	38,90(10)
O121	Dy	O221	124,27(14)	O131	Dy	Dy	68,27(10)
O131	Dy	O221	87,90(15)	O100	Dy	Dy	138,28(14)
O100	Dy	O221	76,47(17)	O231	Dy	Dy	68,81(10)
O231	Dy	O221	82,28(15)	O221	Dy	Dy	85,50(10)
O121	Dy	O141	142,16(14)	O141	Dy	Dy	138,97(10)
O131	Dy	O141	141,60(15)	O111	Dy	Dy	112,89(13)
O100	Dy	O141	69,89(15)	O211	Dy	Dy	115,69(12)
O231	Dy	O141	74,23(14)	O121	Dy	Dy	34,35(8)
O221	Dy	O141	72,30(15)	C11	Dy	Dy	117,46(14)
O121	Dy	O111	79,20(16)	C21	Dy	Dy	60,23(11)
O131	Dy	O111	75,57(16)	C21	O121	Dy	161,8(4)
O100	Dy	O111	72,05(17)	C21	O121	Dy	91,4(3)
O231	Dy	O111	128,72(15)	Dy	O121	Dy	106,76(14)
O221	Dy	O111	147,43(15)	C21	O221	Dy	98,9(3)
O141	Dy	O111	103,78(17)	C41	O141	Dy	140,0(4)
O121	Dy	O211	80,13(15)	C31	O131	Dy	140,0(4)
O131	Dy	O211	125,99(15)	C31	O231	Dy	136,7(4)
O100	Dy	O211	100,12(19)	C11	O111	Dy	94,9(4)
O231	Dy	O211	79,60(16)	C11	O211	Dy	94,8(4)
O221	Dy	O211	144,13(15)	O131	C31	O231	124,5(5)
O141	Dy	O211	73,09(16)	O131	C31	C32	117,8(6)
O111	Dy	O211	52,54(15)	O231	C31	C32	117,7(6)
O121	Dy	O121	73,24(14)	O221	C21	O121	117,9(5)
O131	Dy	O121	69,57(13)	O221	C21	C22	121,4(5)
O100	Dy	O121	115,22(17)	O121	C21	C22	120,8(6)
O231	Dy	O121	71,38(13)	O221	C21	Dy	55,6(3)
O221	Dy	O121	51,27(13)	O121	C21	Dy	62,7(3)
O141	Dy	O121	116,15(14)	C22	C21	Dy	172,9(4)
O111	Dy	O121	139,59(15)	O141	C41	O241	122,2(6)
O211	Dy	O121	144,61(14)	O141	C41	C42	123,3(6)
O121	Dy	C11	78,62(17)	O241	C41	C42	114,5(6)
O131	Dy	C11	100,95(18)	O151	C51	O251	124,3(7)
O100	Dy	C11	85,6(2)	O151	C51	C52	124,4(9)
O231	Dy	C11	104,39(19)	O251	C51	C52	111,3(8)
O221	Dy	C11	157,03(17)	O211	C11	O111	117,8(6)
O141	Dy	C11	88,17(18)	O211	C11	C12	121,5(7)
O111	Dy	C11	26,30(17)	O111	C11	C12	120,7(7)
O211	Dy	C11	26,24(17)	O211	C11	Dy	59,0(3)
O121	Dy	C11	151,70(16)	O111	C11	Dy	58,8(3)
O121	Dy	C21	99,12(15)	C12	C11	Dy	178,6(6)
O131	Dy	C21	75,98(15)	O161	C61	O261	119,4(17)
O100	Dy	C21	94,77(18)	O161	C61	C62	125(2)
O231	Dy	C21	77,29(15)	O261	C61	C62	116(2)
O221	Dy	C21	25,51(14)				

8.4 Propionate

8.4.1 Eisenpropionat, Fe(OPr)₂

Tabelle 95. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von Fe(OPr)₂.

Atom	x	y	z	Ueq
Fe1	0,58420(11)	-0,29258(12)	0,14406(5)	0,0429(7)
Fe2	0,63444(11)	-0,15154(11)	0,18596(5)	0,0448(7)
Fe3	0,6667	-0,27268(13)	0,0833	0,0479(10)
O4	0,6127(5)	-0,3678(5)	0,1447(2)	0,051(3)
O5	0,7146(6)	-0,1654(6)	0,2047(3)	0,066(3)
O6	0,5307(5)	-0,2456(5)	0,1376(2)	0,043(3)
O7	0,5457(5)	-0,1635(6)	0,1683(2)	0,050(3)
O8	0,6286(5)	-0,2472(5)	0,1835(2)	0,049(3)
O9	0,6949(6)	-0,3232(5)	0,1119(2)	0,053(3)
O10	0,6838(6)	-0,1269(5)	0,1468(2)	0,058(3)
O11	0,5915(6)	-0,1730(5)	0,2279(2)	0,057(3)
O12	0,6684(6)	-0,2146(6)	0,1197(2)	0,059(3)
O13	0,5642(6)	-0,3220(6)	0,0994(2)	0,048(3)
C14	0,5212(10)	-0,3762(12)	0,0901(3)	0,056(5)
C15	0,6853(10)	-0,2253(9)	0,1968(4)	0,055(5)
C16	0,6629(10)	-0,3661(9)	0,1306(4)	0,063(5)
C17	0,6969(10)	-0,1530(10)	0,1253(4)	0,080(7)
C18	0,4613(9)	-0,1991(9)	0,1317(3)	0,057(5)
H18A	0,4278	-0,2084	0,1466	0,20(4)
H18B	0,4784	-0,1542	1/8	0,20(4)
C19	0,5162(8)	-0,2047(9)	0,1461(4)	0,047(4)
C20	0,4920(9)	-0,3815(9)	0,0588(4)	0,056(5)
H20A	0,5277	-0,357	0,0449	0,20(4)
H20B	0,4652	-0,3607	0,0593	0,20(4)
C21	0,4304(9)	-0,2434(9)	0,1061(4)	0,071(6)
H21A	0,396	-0,237	0,0982	259(1263)
H21B	0,4123	-0,2881	0,1125	259(1263)
H21C	0,4628	-0,2339	0,0909	259(1263)
C22	0,6757(12)	-0,4217(11)	0,1371(5)	0,099(8)
H22A	0,6776	-0,4256	0,1586	0,20(4)
H22B	0,6384	-0,4621	0,1299	0,20(4)
C23	0,4494(15)	-0,4529(13)	0,0469(5)	0,120(10)
H23A	0,4331	-0,4518	0,0274	259(1263)
H23B	0,413	-0,4773	0,0602	259(1263)
H23C	0,4757	-0,4736	0,0459	259(1263)
C24	0,7124(15)	-0,2691(13)	0,2009(6)	0,116(9)
H24A	0,6964	-0,2911	0,22	0,20(4)
H24B	0,6933	-0,3027	0,1856	0,20(4)
C25	0,7558(18)	-0,1033(10)	0,1066(8)	0,28(3)
H25A	0,7625	-0,1247	0,0895	0,20(4)
H25B	0,7957	-0,083	0,1185	0,20(4)
C26	0,7361(13)	-0,4166(13)	0,1241(7)	0,136(12)
H26A	0,739	-0,4546	0,1296	259(1263)
H26B	0,7738	-0,3778	0,1315	259(1263)

H26C	0,7346	-0,4143	0,1027	259(1263)
C27	0,737(3)	-0,051(2)	0,0964(13)	0,38(5)
H27A	0,7723	-0,0185	0,0845	259(1263)
H27B	0,7306	-0,0312	0,1136	259(1263)
H27C	0,6977	-0,0725	0,0848	259(1263)
C28	0,779(2)	-0,244(2)	0,2004(13)	0,26(3)
H28A	0,7878	-0,2795	0,2034	259(1263)
H28B	0,7988	-0,2124	0,216	259(1263)
H28C	0,7956	-0,2241	0,1814	259(1263)

Tabelle 96. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von Fe(OPr)_2 .

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Fe1	0,0532(16)	0,0456(15)	0,0326(12)	0,0104(11)	0,0110(11)	0,0266(13)
Fe2	0,0438(15)	0,0511(16)	0,0393(14)	-0,0047(11)	0,0041(11)	0,0235(13)
Fe3	0,068(3)	0,0405(14)	0,045(2)	0,0126(9)	0,0252(18)	0,0339(13)
O4	0,059(8)	0,048(7)	0,044(7)	0,019(5)	0,010(6)	0,024(6)
O5	0,049(8)	0,063(9)	0,078(9)	-0,009(7)	-0,011(6)	0,022(7)
O6	0,064(8)	0,044(7)	0,032(6)	-0,005(5)	-0,002(5)	0,035(6)
O7	0,055(7)	0,078(9)	0,033(6)	-0,012(6)	-0,007(6)	0,046(7)
O8	0,040(7)	0,070(8)	0,037(6)	0,010(6)	0,002(5)	0,027(6)
O9	0,063(8)	0,052(7)	0,048(7)	0,026(6)	0,024(6)	0,031(6)
O10	0,074(9)	0,055(8)	0,050(7)	0,002(6)	0,030(6)	0,036(7)
O11	0,067(9)	0,052(8)	0,046(7)	0,001(6)	-0,007(6)	0,025(7)
O12	0,076(9)	0,040(7)	0,067(8)	0,009(6)	0,026(6)	0,034(7)
O13	0,080(9)	0,046(7)	0,026(6)	-0,004(5)	0,009(6)	0,039(7)
C14	0,076(15)	0,104(17)	0,022(9)	0,013(11)	0,012(9)	0,069(14)
C15	0,061(13)	0,058(13)	0,066(12)	-0,004(10)	0,004(10)	0,044(11)
C16	0,091(16)	0,060(13)	0,056(12)	0,009(10)	0,028(11)	0,052(12)
C17	0,090(17)	0,058(14)	0,079(14)	0,021(12)	0,056(13)	0,027(13)
C18	0,080(13)	0,077(13)	0,050(11)	-0,038(10)	-0,031(10)	0,066(12)
C19	0,049(11)	0,060(13)	0,048(11)	0,028(10)	0,015(9)	0,039(10)
C20	0,071(13)	0,069(13)	0,048(11)	-0,003(9)	0,001(9)	0,051(11)
C21	0,068(14)	0,077(14)	0,051(11)	-0,039(10)	-0,006(9)	0,024(11)
C22	0,12(2)	0,080(16)	0,13(2)	0,058(14)	0,041(16)	0,076(16)
C23	0,20(3)	0,11(2)	0,071(15)	-0,037(14)	-0,062(17)	0,09(2)
C24	0,13(2)	0,10(2)	0,15(2)	-0,029(17)	-0,048(19)	0,086(19)
C25	0,42(5)	0,045(14)	0,38(5)	0,11(2)	0,40(5)	0,12(2)
C26	0,13(2)	0,14(2)	0,22(3)	0,09(2)	0,09(2)	0,13(2)
C27	0,58(10)	0,20(4)	0,43(8)	0,14(5)	0,35(9)	0,26(6)
C28	0,12(3)	0,24(5)	0,46(8)	0,04(5)	0,04(4)	0,12(3)

Tabelle 97. Atomabstände/Å von Fe(OPr)₂.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Fe1	O8	2,057(11)	O6	C19	1,228(18)
Fe1	O6	2,068(11)	O7	C19	1,32(2)
Fe1	O13	2,088(10)	O7	Fe1	2,147(11)
Fe1	O7	2,147(11)	O8	C15	1,31(2)
Fe1	O4	2,180(11)	O9	C16	1,233(19)
Fe1	O12	2,199(11)	O10	C17	1,26(2)
Fe2	O10	2,021(10)	O11	C14	1,31(2)
Fe2	O11	2,072(12)	O12	C17	1,28(2)
Fe2	O7	2,113(10)	O13	C14	1,24(2)
Fe2	O4	2,162(11)	C14	O11	1,31(2)
Fe2	O8	2,185(11)	C14	C20	1,53(2)
Fe2	O5	2,231(12)	C15	C24	1,47(3)
Fe3	O9	2,066(11)	C16	C22	1,51(2)
Fe3	O9	2,066(11)	C17	C25	1,54(2)
Fe3	O12	2,111(11)	C18	C21	1,47(2)
Fe3	O12	2,111(11)	C18	C19	1,51(2)
Fe3	O13	2,206(11)	C20	C23	1,56(3)
Fe3	O13	2,206(11)	C22	C26	1,48(3)
O4	C16	1,323(19)	C24	C28	1,36(4)
O4	Fe2	2,162(11)	C25	C27	1,55(6)
O5	C15	1,268(19)			

Tabelle 98. Winkel/° von Fe(OPr)₂.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O8	Fe1	O6	97,5(4)	O12	Fe3	O13	75,6(4)
O8	Fe1	O13	164,6(5)	O13	Fe3	O13	177,7(6)
O6	Fe1	O13	86,9(4)	C16	O4	Fe2	124,9(11)
O8	Fe1	O7	95,0(4)	C16	O4	Fe1	126,8(10)
O6	Fe1	O7	92,8(4)	Fe2	O4	Fe1	97,7(5)
O13	Fe1	O7	99,6(4)	C15	O5	Fe2	91,6(10)
O8	Fe1	O4	97,3(4)	C19	O6	Fe1	148,6(11)
O6	Fe1	O4	161,8(4)	C19	O7	Fe2	120,0(9)
O13	Fe1	O4	81,6(4)	C19	O7	Fe1	138,1(10)
O7	Fe1	O4	75,3(4)	Fe2	O7	Fe1	100,3(5)
O8	Fe1	O12	89,0(4)	C15	O8	Fe1	138,4(10)
O6	Fe1	O12	91,1(4)	C15	O8	Fe2	92,6(10)
O13	Fe1	O12	76,2(5)	Fe1	O8	Fe2	109,3(5)
O7	Fe1	O12	174,0(4)	C16	O9	Fe3	130,5(12)
O4	Fe1	O12	99,8(4)	C17	O10	Fe2	140,2(12)
O10	Fe2	O11	175,1(5)	C14	O11	Fe2	130,8(11)
O10	Fe2	O7	95,8(4)	C17	O12	Fe3	135,6(11)
O11	Fe2	O7	88,8(4)	C17	O12	Fe1	126,0(10)
O10	Fe2	O4	89,4(4)	Fe3	O12	Fe1	97,2(5)
O11	Fe2	O4	90,1(4)	C14	O13	Fe1	126,7(10)
O7	Fe2	O4	76,4(4)	C14	O13	Fe3	123,0(10)
O10	Fe2	O8	89,0(4)	Fe1	O13	Fe3	97,7(5)

O11	Fe2	O8	91,3(4)	O13	C14	O11	125,6(15)
O7	Fe2	O8	107,1(4)	O13	C14	C20	119,6(17)
O4	Fe2	O8	176,2(4)	O11	C14	C20	114,6(19)
O10	Fe2	O5	87,8(5)	O5	C15	O8	116,4(15)
O11	Fe2	O5	88,1(4)	O5	C15	C24	123,9(19)
O7	Fe2	O5	166,1(5)	O8	C15	C24	119,7(18)
O4	Fe2	O5	117,1(5)	O9	C16	O4	121,3(16)
O8	Fe2	O5	59,4(4)	O9	C16	C22	122,3(17)
O9	Fe3	O9	85,4(6)	O4	C16	C22	116,3(16)
O9	Fe3	O12	89,2(4)	O10	C17	O12	125,8(16)
O9	Fe3	O12	161,7(4)	O10	C17	C25	113,2(18)
O9	Fe3	O12	161,7(4)	O12	C17	C25	120,8(17)
O9	Fe3	O12	89,2(4)	C21	C18	C19	114,3(15)
O12	Fe3	O12	100,8(6)	O6	C19	O7	124,0(15)
O9	Fe3	O13	94,3(4)	O6	C19	C18	121,3(17)
O9	Fe3	O13	87,4(4)	O7	C19	C18	114,7(15)
O12	Fe3	O13	75,6(4)	C14	C20	C23	114,8(17)
O12	Fe3	O13	102,9(4)	C26	C22	C16	116,9(18)
O9	Fe3	O13	87,4(4)	C28	C24	C15	120(3)
O9	Fe3	O13	94,3(4)	C17	C25	C27	105(3)
O12	Fe3	O13	102,9(4)				

8.4.2 Neodympionat-Propionsäure-Addukt, Nd(OPr)₃(HOPr)

Tabelle 99. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / 10⁻¹·pm² von Nd(OPr)₃(HOPr).

Atom	x	y	z	Ueq
Nd1	0,88023(2)	0,04010(2)	0,916159(19)	0,02728(9)
Nd2	0,89585(2)	0,02036(2)	0,606604(18)	0,02560(9)
O3	1,1053(3)	0,0959(3)	0,5839(3)	0,0300(7)
O4	0,9333(3)	0,0132(4)	1,0867(3)	0,0338(8)
O5	1,0262(3)	0,0588(4)	0,7888(3)	0,0320(7)
O6	0,7693(3)	-0,0682(4)	0,7197(3)	0,0327(7)
O7	0,8657(4)	0,2091(4)	0,8544(3)	0,0386(9)
O8	0,9402(3)	-0,1587(4)	0,5974(3)	0,0345(8)
O9	0,6475(3)	-0,0582(4)	0,8287(3)	0,0397(9)
O10	0,9667(3)	0,2372(4)	0,7271(3)	0,0347(8)
O11	1,2000(4)	0,1837(4)	1,1153(3)	0,0399(9)
O12	0,7091(4)	0,0726(4)	0,5966(3)	0,0388(8)
O13	1,0841(3)	-0,1617(4)	0,5057(3)	0,0348(8)
O14	1,0676(3)	0,2288(4)	1,0219(3)	0,0374(8)
O15	0,7131(3)	-0,1639(4)	0,4595(3)	0,0362(8)
O16	0,7770(4)	0,1398(4)	1,0371(3)	0,0384(8)
O17	0,7588(4)	0,2431(4)	0,5488(4)	0,0506(11)
H17	0,8194	0,2305	0,5375	0,09(2)
C18	0,5941(7)	0,3104(7)	1,1195(6)	0,0629(19)
H18A	0,535	0,3021	1,1631	0,096(5)
H18B	0,5578	0,3117	1,0527	0,096(5)
H18C	0,6703	0,3879	1,1551	0,096(5)
O19	0,7227(5)	0,2610(5)	0,9670(4)	0,0574(13)

H19	0,7557	0,2381	0,9207	0,09(2)
C20	0,7162(6)	0,1989(6)	1,0319(5)	0,0420(13)
C21	1,0030(5)	-0,2105(5)	0,5552(4)	0,0356(11)
C22	1,2669(5)	0,2982(6)	0,6976(5)	0,0436(13)
H22A	1,2438	0,2739	0,758	0,096(5)
H22B	1,2236	0,3466	0,684	0,096(5)
C23	0,6902(5)	0,1617(6)	0,5901(4)	0,0402(12)
C24	1,0937(4)	0,0201(5)	0,8341(4)	0,0285(10)
C25	0,9313(5)	0,2792(5)	0,8052(4)	0,0341(11)
C26	1,2206(5)	0,1808(5)	0,6029(4)	0,0298(10)
C27	0,9646(8)	0,4184(6)	0,8468(6)	0,0573(17)
H27A	0,8878	0,4255	0,8548	0,096(5)
H27B	1,0212	0,4556	0,9174	0,096(5)
C28	1,2064(5)	0,0139(6)	0,7995(4)	0,0418(13)
H28A	1,2082	0,0275	0,7319	0,096(5)
H28B	1,2011	-0,0693	0,7901	0,096(5)
C29	0,9817(7)	-0,3376(7)	0,5621(7)	0,0610(19)
H29A	0,9952	-0,3853	0,4984	0,096(5)
H29B	1,0445	-0,324	0,6225	0,096(5)
C30	1,1690(5)	0,2598(6)	1,0867(4)	0,0386(12)
C31	0,5518(8)	-0,3249(7)	0,6096(7)	0,071(2)
H31A	0,4788	-0,3848	0,5525	0,096(5)
H31B	0,5534	-0,3568	0,6673	0,096(5)
H31C	0,6269	-0,3123	0,5848	0,096(5)
C32	0,5462(6)	-0,2008(7)	0,6477(5)	0,0526(16)
H32A	0,5429	-0,1698	0,5888	0,096(5)
H32B	0,4694	-0,2143	0,6714	0,096(5)
C33	0,6578(5)	-0,1032(5)	0,7370(4)	0,0339(11)
C34	0,5112(7)	0,0977(9)	0,6785(6)	0,068(2)
H34A	0,4503	0,1229	0,7038	0,096(5)
H34B	0,5639	0,0957	0,7366	0,096(5)
H34C	0,468	0,0149	0,6248	0,096(5)
C35	0,5910(7)	0,1903(8)	0,6320(6)	0,0578(18)
H35A	0,5363	0,1928	0,5745	0,096(5)
H35B	0,6317	0,274	0,6863	0,096(5)
C36	1,2607(7)	0,3984(6)	1,1326(6)	0,0585(17)
H36A	1,2234	0,4427	1,1776	0,096(5)
H36B	1,3365	0,4088	1,1773	0,096(5)
C37	1,3264(6)	0,1148(9)	0,8832(6)	0,066(2)
H37A	1,3986	0,1106	0,8609	0,096(5)
H37B	1,3247	0,1005	0,9498	0,096(5)
H37C	1,3317	0,197	0,8917	0,096(5)
C38	0,6242(7)	0,2003(8)	1,0998(6)	0,0578(19)
H38A	0,5459	0,1229	1,0662	0,096(5)
H38B	0,6581	0,199	1,1682	0,096(5)
C39	1,4067(6)	0,3823(7)	0,7273(7)	0,075(2)
H39A	1,4281	0,4547	0,7892	0,096(5)
H39B	1,4305	0,4101	0,6693	0,096(5)
H39C	1,4509	0,3361	0,7424	0,096(5)
C40	1,0245(9)	0,4955(7)	0,7822(8)	0,082(3)
H40A	1,0406	0,5816	0,8162	0,096(5)
H40B	0,9688	0,4619	0,7126	0,096(5)
H40C	1,1027	0,4929	0,7759	0,096(5)
C41	1,2970(9)	0,4585(9)	1,0507(8)	0,087(3)

H41A	1,3551	0,5466	1,0854	0,096(5)
H41B	1,2228	0,4504	1,0069	0,096(5)
H41C	1,3365	0,417	1,007	0,096(5)
C42	0,8561(11)	-0,4139(10)	0,5732(14)	0,145(6)
H42A	0,8504	-0,4928	0,577	0,096(5)
H42B	0,793	-0,4302	0,5128	0,096(5)
H42C	0,8425	-0,3688	0,637	0,096(5)

Tabelle 100. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von Nd(OPr)₃(HOPr).

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Nd1	0,02905(15)	0,03778(17)	0,02413(15)	0,01555(12)	0,01169(11)	0,01938(12)
Nd2	0,02770(14)	0,03161(16)	0,02307(15)	0,01289(11)	0,01092(10)	0,01534(12)
O3	0,0243(16)	0,0332(18)	0,0294(18)	0,0125(15)	0,0087(14)	0,0085(14)
O4	0,0393(19)	0,046(2)	0,0283(18)	0,0204(17)	0,0157(15)	0,0242(18)
O5	0,0332(18)	0,043(2)	0,0274(18)	0,0164(16)	0,0122(15)	0,0213(17)
O6	0,0253(16)	0,044(2)	0,0335(19)	0,0194(17)	0,0131(14)	0,0150(15)
O7	0,048(2)	0,053(2)	0,035(2)	0,0248(19)	0,0192(17)	0,034(2)
O8	0,043(2)	0,045(2)	0,0311(19)	0,0209(17)	0,0195(16)	0,0270(18)
O9	0,0335(19)	0,060(3)	0,035(2)	0,0248(19)	0,0154(16)	0,0235(18)
O10	0,0397(19)	0,038(2)	0,0312(19)	0,0145(16)	0,0145(16)	0,0193(17)
O11	0,040(2)	0,039(2)	0,041(2)	0,0180(18)	0,0048(17)	0,0173(18)
O12	0,040(2)	0,044(2)	0,041(2)	0,0181(18)	0,0144(17)	0,0237(18)
O13	0,042(2)	0,041(2)	0,0354(19)	0,0193(17)	0,0192(16)	0,0253(18)
O14	0,0365(19)	0,037(2)	0,040(2)	0,0153(17)	0,0063(16)	0,0167(17)
O15	0,0305(18)	0,046(2)	0,0334(19)	0,0121(17)	0,0131(15)	0,0175(17)
O16	0,047(2)	0,053(2)	0,0332(19)	0,0198(18)	0,0193(17)	0,035(2)
O17	0,054(3)	0,056(3)	0,071(3)	0,036(2)	0,033(2)	0,040(2)
C18	0,065(4)	0,062(4)	0,079(5)	0,022(4)	0,043(4)	0,039(4)
O19	0,081(3)	0,080(3)	0,065(3)	0,050(3)	0,049(3)	0,064(3)
C20	0,046(3)	0,051(3)	0,041(3)	0,020(3)	0,020(3)	0,028(3)
C21	0,040(3)	0,042(3)	0,035(3)	0,020(2)	0,015(2)	0,021(2)
C22	0,041(3)	0,037(3)	0,040(3)	0,001(3)	0,008(2)	0,013(3)
C23	0,044(3)	0,056(4)	0,031(3)	0,016(3)	0,011(2)	0,032(3)
C24	0,027(2)	0,041(3)	0,019(2)	0,012(2)	0,0046(18)	0,017(2)
C25	0,038(3)	0,044(3)	0,029(3)	0,017(2)	0,011(2)	0,023(2)
C26	0,033(2)	0,034(3)	0,023(2)	0,011(2)	0,0073(19)	0,015(2)
C27	0,090(5)	0,045(4)	0,050(4)	0,017(3)	0,031(4)	0,039(4)
C28	0,038(3)	0,072(4)	0,037(3)	0,030(3)	0,019(2)	0,036(3)
C29	0,078(5)	0,059(4)	0,086(5)	0,048(4)	0,048(4)	0,047(4)
C30	0,038(3)	0,048(3)	0,035(3)	0,019(3)	0,011(2)	0,021(3)
C31	0,070(5)	0,055(5)	0,060(5)	0,011(4)	0,018(4)	0,008(4)
C32	0,034(3)	0,069(4)	0,045(3)	0,021(3)	0,009(3)	0,013(3)
C33	0,033(2)	0,046(3)	0,027(3)	0,018(2)	0,008(2)	0,018(2)
C34	0,062(4)	0,119(7)	0,063(5)	0,047(5)	0,033(4)	0,063(5)
C35	0,055(4)	0,086(5)	0,063(4)	0,037(4)	0,029(3)	0,051(4)
C36	0,052(4)	0,038(3)	0,068(5)	0,021(3)	-0,006(3)	0,008(3)
C37	0,034(3)	0,118(7)	0,054(4)	0,046(5)	0,017(3)	0,031(4)
C38	0,071(4)	0,083(5)	0,069(4)	0,048(4)	0,049(4)	0,060(4)
C39	0,041(4)	0,051(4)	0,094(6)	-0,011(4)	0,016(4)	0,007(3)
C40	0,094(6)	0,039(4)	0,108(7)	0,025(4)	0,044(6)	0,022(4)

C41	0,089(6)	0,065(5)	0,094(7)	0,043(5)	0,019(5)	0,015(5)
C42	0,112(9)	0,083(7)	0,30(2)	0,126(11)	0,096(11)	0,056(7)

Tabelle 101. Atomabstände/Å von Nd(OPr)₃(HOPr).

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Nd1	O14	2,395(4)	O9	C33	1,252(6)
Nd1	O11	2,411(4)	O10	C25	1,240(6)
Nd1	O4	2,455(3)	O11	C30	1,265(6)
Nd1	O7	2,493(3)	O11	Nd1	2,411(4)
Nd1	O16	2,504(3)	O12	C23	1,226(7)
Nd1	O9	2,522(4)	O13	C21	1,278(6)
Nd1	O6	2,534(4)	O13	Nd2	2,551(3)
Nd1	O4	2,563(3)	O14	C30	1,259(6)
Nd1	O5	2,567(3)	O15	C26	1,251(6)
Nd1	C33	2,913(5)	O16	C20	1,224(6)
Nd1	C24	2,961(4)	O17	C23	1,311(7)
Nd1	Nd1	4,0324(7)	C18	C38	1,500(9)
Nd2	O3	2,379(3)	O19	C20	1,295(7)
Nd2	O6	2,421(3)	C20	C38	1,508(7)
Nd2	O8	2,437(3)	C21	C29	1,507(8)
Nd2	O10	2,449(4)	C22	C26	1,491(7)
Nd2	O15	2,539(4)	C22	C39	1,500(9)
Nd2	O13	2,551(3)	C23	C35	1,492(7)
Nd2	O12	2,556(3)	C24	O4	1,270(5)
Nd2	O5	2,567(3)	C24	C28	1,496(6)
Nd2	O3	2,575(3)	C25	C27	1,511(8)
Nd2	C26	2,933(5)	C26	O15	1,251(6)
Nd2	Nd2	4,0636(7)	C26	Nd2	2,933(5)
O3	C26	1,292(6)	C27	C40	1,484(11)
O3	Nd2	2,575(3)	C28	C37	1,521(10)
O4	C24	1,270(5)	C29	C42	1,464(12)
O4	Nd1	2,563(3)	C30	C36	1,503(9)
O5	C24	1,266(5)	C31	C32	1,504(11)
O6	C33	1,294(6)	C32	C33	1,496(8)
O7	C25	1,293(6)	C34	C35	1,495(10)
O8	C21	1,256(6)	C36	C41	1,495(10)

Tabelle 102. Winkel/° von Nd(OPr)₃(HOPr).

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O14	Nd1	O11	136,23(12)	O13	Nd2	O5	132,25(12)
O14	Nd1	O4	73,74(13)	O12	Nd2	O5	119,61(11)
O11	Nd1	O4	71,94(13)	O3	Nd2	O3	69,82(13)
O14	Nd1	O7	75,56(13)	O6	Nd2	O3	127,63(12)
O11	Nd1	O7	147,20(13)	O8	Nd2	O3	68,16(11)
O4	Nd1	O7	137,41(13)	O10	Nd2	O3	139,20(11)
O14	Nd1	O16	82,78(13)	O15	Nd2	O3	50,90(10)

O11	Nd1	O16	112,52(13)	O13	Nd2	O3	70,20(11)
O4	Nd1	O16	74,29(11)	O12	Nd2	O3	108,38(11)
O7	Nd1	O16	73,20(11)	O5	Nd2	O3	131,40(10)
O14	Nd1	O9	147,09(13)	O3	Nd2	C26	95,34(13)
O11	Nd1	O9	74,07(13)	O6	Nd2	C26	103,66(13)
O4	Nd1	O9	115,72(12)	O8	Nd2	C26	67,43(13)
O7	Nd1	O9	78,06(13)	O10	Nd2	C26	152,72(12)
O16	Nd1	O9	70,95(13)	O15	Nd2	C26	25,13(12)
O14	Nd1	O6	135,69(12)	O13	Nd2	C26	82,27(13)
O11	Nd1	O6	74,68(12)	O12	Nd2	C26	92,29(13)
O4	Nd1	O6	146,57(12)	O5	Nd2	C26	137,76(12)
O7	Nd1	O6	74,54(12)	O3	Nd2	C26	26,10(12)
O16	Nd1	O6	118,06(11)	O3	Nd2	Nd2	36,50(8)
O9	Nd1	O6	51,42(11)	O6	Nd2	Nd2	147,98(9)
O14	Nd1	O4	72,51(12)	O8	Nd2	Nd2	68,81(8)
O11	Nd1	O4	72,12(12)	O10	Nd2	Nd2	115,59(8)
O4	Nd1	O4	73,07(12)	O15	Nd2	Nd2	84,10(8)
O7	Nd1	O4	123,67(11)	O13	Nd2	Nd2	67,27(7)
O16	Nd1	O4	143,35(12)	O12	Nd2	Nd2	130,74(8)
O9	Nd1	O4	139,79(13)	O5	Nd2	Nd2	107,04(7)
O6	Nd1	O4	98,43(11)	O3	Nd2	Nd2	33,33(7)
O14	Nd1	O5	77,93(12)	C26	Nd2	Nd2	59,03(9)
O11	Nd1	O5	98,31(12)	C26	O3	Nd2	154,0(3)
O4	Nd1	O5	122,14(11)	C26	O3	Nd2	92,6(3)
O7	Nd1	O5	78,35(11)	Nd2	O3	Nd2	110,18(13)
O16	Nd1	O5	148,80(12)	C24	O4	Nd1	153,6(3)
O9	Nd1	O5	115,46(11)	C24	O4	Nd1	95,2(3)
O6	Nd1	O5	64,57(11)	Nd1	O4	Nd1	106,93(12)
O4	Nd1	O5	50,48(10)	C24	O5	Nd2	142,5(3)
O14	Nd1	C33	152,39(13)	C24	O5	Nd1	95,1(3)
O11	Nd1	C33	69,89(14)	Nd2	O5	Nd1	107,44(12)
O4	Nd1	C33	132,36(14)	C33	O6	Nd2	142,9(3)
O7	Nd1	C33	77,50(14)	C33	O6	Nd1	93,4(3)
O16	Nd1	C33	95,18(14)	Nd2	O6	Nd1	113,25(14)
O9	Nd1	C33	25,36(13)	C25	O7	Nd1	133,7(3)
O6	Nd1	C33	26,33(12)	C21	O8	Nd2	140,3(3)
O4	Nd1	C33	119,18(13)	C33	O9	Nd1	95,1(3)
O5	Nd1	C33	90,87(12)	C25	O10	Nd2	131,3(3)
O14	Nd1	C24	73,20(13)	C30	O11	Nd1	140,1(4)
O11	Nd1	C24	85,24(13)	C23	O12	Nd2	136,9(4)
O4	Nd1	C24	97,59(11)	C21	O13	Nd2	134,4(3)
O7	Nd1	C24	101,01(12)	C30	O14	Nd1	138,5(4)
O16	Nd1	C24	155,96(14)	C26	O15	Nd2	95,3(3)
O9	Nd1	C24	131,63(13)	C20	O16	Nd1	136,4(3)
O6	Nd1	C24	81,30(11)	O16	C20	O19	123,4(5)
O4	Nd1	C24	25,28(11)	O16	C20	C38	121,4(5)
O5	Nd1	C24	25,20(11)	O19	C20	C38	115,2(5)
C33	Nd1	C24	106,47(13)	O8	C21	O13	123,5(5)
O14	Nd1	Nd1	68,80(8)	O8	C21	C29	118,8(5)
O11	Nd1	Nd1	67,42(9)	O13	C21	C29	117,7(5)
O4	Nd1	Nd1	37,44(8)	C26	C22	C39	115,2(5)
O7	Nd1	Nd1	143,18(10)	O12	C23	O17	122,7(5)
O16	Nd1	Nd1	110,18(8)	O12	C23	C35	123,3(5)
O9	Nd1	Nd1	138,55(9)	O17	C23	C35	114,0(5)

O6	Nd1	Nd1	126,97(8)	O5	C24	O4	119,2(4)
O4	Nd1	Nd1	35,63(7)	O5	C24	C28	122,7(4)
O5	Nd1	Nd1	85,39(7)	O4	C24	C28	118,1(4)
C33	Nd1	Nd1	136,06(11)	O5	C24	Nd1	59,7(2)
C24	Nd1	Nd1	60,38(8)	O4	C24	Nd1	59,5(2)
O3	Nd2	O6	141,96(11)	C28	C24	Nd1	176,5(3)
O3	Nd2	O8	77,60(12)	O10	C25	O7	123,1(5)
O6	Nd2	O8	79,78(11)	O10	C25	C27	119,8(5)
O3	Nd2	O10	85,32(12)	O7	C25	C27	117,1(5)
O6	Nd2	O10	91,89(12)	O15	C26	O3	119,6(5)
O8	Nd2	O10	138,47(12)	O15	C26	C22	122,9(5)
O3	Nd2	O15	120,48(11)	O3	C26	C22	117,5(4)
O6	Nd2	O15	82,61(12)	O15	C26	Nd2	59,5(3)
O8	Nd2	O15	76,37(12)	O3	C26	Nd2	61,3(2)
O10	Nd2	O15	143,28(12)	C22	C26	Nd2	166,9(4)
O3	Nd2	O13	72,94(11)	C40	C27	C25	117,1(6)
O6	Nd2	O13	141,52(11)	C24	C28	C37	109,6(5)
O8	Nd2	O13	135,08(11)	C42	C29	C21	114,7(6)
O10	Nd2	O13	71,82(12)	O14	C30	O11	125,2(6)
O15	Nd2	O13	90,20(12)	O14	C30	C36	117,1(5)
O3	Nd2	O12	140,70(12)	O11	C30	C36	117,7(5)
O6	Nd2	O12	71,77(11)	C33	C32	C31	112,0(6)
O8	Nd2	O12	139,97(13)	O9	C33	O6	118,9(5)
O10	Nd2	O12	71,20(12)	O9	C33	C32	122,4(5)
O15	Nd2	O12	72,61(12)	O6	C33	C32	118,6(5)
O13	Nd2	O12	70,00(11)	O9	C33	Nd1	59,6(3)
O3	Nd2	O5	77,57(11)	O6	C33	Nd1	60,3(3)
O6	Nd2	O5	66,15(11)	C32	C33	Nd1	167,7(4)
O8	Nd2	O5	70,39(12)	C23	C35	C34	114,6(6)
O10	Nd2	O5	69,07(12)	C41	C36	C30	113,9(7)
O15	Nd2	O5	137,42(12)	C18	C38	C20	116,2(5)

8.5 Benzoate

8.5.1 Eisenbenzoat, Fe(OBz)₂

Tabelle 103. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von Fe(OBz)₂.

Atom	x	y	z	Ueq
Fe1	1	0	1/2	0,0386(2)
Fe2	1	0,13217(6)	1/4	0,0444(3)
O3	1,01631(18)	0,1353(2)	0,5605(3)	0,0500(7)
O4	1,08791(17)	0,0201(2)	0,3662(3)	0,0537(8)
O5	1,08224(17)	0,0440(2)	0,1622(3)	0,0492(7)
O6	1,0180(2)	0,2225(2)	0,3872(3)	0,0626(9)
C7	1,1771(2)	-0,0667(3)	0,2510(4)	0,0428(10)
C8	1,1119(2)	0,0014(3)	0,2605(4)	0,0425(9)
C9	1,2033(3)	-0,0880(3)	0,1345(5)	0,0502(11)

C10	1,0604(2)	0,2939(3)	0,5801(4)	0,0445(10)
C11	1,0291(2)	0,2113(3)	0,5051(4)	0,0436(10)
C12	1,0854(3)	0,2856(4)	0,7060(5)	0,0555(12)
C13	1,0643(3)	0,3812(3)	0,5217(5)	0,0607(13)
C14	1,2116(3)	-0,1109(3)	0,3583(5)	0,0588(12)
C15	1,2628(3)	-0,1532(4)	0,1248(7)	0,0708(16)
C16	1,1154(3)	0,3624(4)	0,7730(6)	0,0725(15)
C17	1,1187(3)	0,4481(4)	0,7154(6)	0,0764(17)
C18	1,0937(4)	0,4584(4)	0,5907(6)	0,0763(17)
C19	1,2715(3)	-0,1756(4)	0,3461(8)	0,0762(18)
C20	1,2963(4)	-0,1963(4)	0,2315(8)	0,0839(19)
H21	1,084(3)	0,227(3)	0,744(4)	0,057(14)
H22	1,190(2)	-0,100(3)	0,436(4)	0,048(12)
H23	1,184(2)	-0,057(3)	0,061(4)	0,050(13)
H24	1,046(3)	0,387(3)	0,435(5)	0,062(14)
H25	1,095(3)	0,519(4)	0,548(5)	0,073(16)
H26	1,285(3)	-0,167(4)	0,050(5)	0,077(17)
H27	1,331(4)	-0,243(4)	0,209(6)	0,10(2)
H28	1,137(3)	0,505(4)	0,762(5)	0,094(18)
H29	1,284(3)	-0,203(4)	0,414(5)	0,074(18)
H30	1,123(3)	0,358(4)	0,859(5)	0,082(17)

Tabelle 104. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Fe}(\text{OBz})_2$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Fe1	0,0460(5)	0,0392(4)	0,0311(4)	0,0013(4)	0,0054(4)	-0,0002(4)
Fe2	0,0549(6)	0,0456(5)	0,0330(5)	0	0,0059(4)	0
O3	0,062(2)	0,0443(16)	0,0438(16)	-0,0014(14)	0,0070(14)	-0,0006(15)
O4	0,0532(18)	0,065(2)	0,0438(17)	-0,0072(14)	0,0128(14)	-0,0023(15)
O5	0,0543(18)	0,0507(16)	0,0417(17)	0,0002(14)	-0,0022(14)	0,0022(14)
O6	0,101(3)	0,0502(18)	0,0362(17)	0,0016(14)	0,0009(17)	-0,0048(17)
C7	0,034(2)	0,048(2)	0,047(2)	-0,0020(19)	0,0038(19)	-0,0026(18)
C8	0,041(2)	0,048(2)	0,038(2)	-0,003(2)	0,0041(17)	-0,005(2)
C9	0,042(3)	0,059(3)	0,051(3)	-0,008(2)	0,010(2)	-0,005(2)
C10	0,048(3)	0,041(2)	0,045(2)	-0,0072(19)	0,008(2)	0,0001(19)
C11	0,055(3)	0,039(2)	0,038(2)	-0,0056(19)	0,008(2)	0,0007(19)
C12	0,064(3)	0,051(3)	0,050(3)	-0,009(2)	-0,005(2)	0,007(2)
C13	0,074(4)	0,052(3)	0,058(3)	-0,002(2)	0,013(3)	-0,008(2)
C14	0,057(3)	0,060(3)	0,058(3)	0,000(3)	-0,004(3)	0,001(2)
C15	0,055(3)	0,070(4)	0,090(4)	-0,023(3)	0,021(3)	-0,001(3)
C16	0,079(4)	0,074(4)	0,061(3)	-0,021(3)	-0,017(3)	0,008(3)
C17	0,075(4)	0,060(4)	0,093(5)	-0,027(3)	0,002(3)	-0,013(3)
C18	0,094(5)	0,047(3)	0,089(5)	-0,007(3)	0,015(4)	-0,020(3)
C19	0,063(4)	0,067(4)	0,095(5)	0,016(4)	-0,019(4)	0,009(3)
C20	0,055(4)	0,070(4)	0,127(6)	-0,021(4)	0,006(4)	0,013(3)

Tabelle 105. Atomabstände/Å von Fe(OBz)₂.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Fe1	O3	2,041(3)	C7	C9	1,385(6)
Fe1	O3	2,041(3)	C7	C14	1,391(6)
Fe1	O4	2,169(3)	C7	C8	1,484(6)
Fe1	O4	2,169(3)	C9	C15	1,383(7)
Fe1	O5	2,222(3)	C10	C12	1,378(6)
Fe1	O5	2,222(3)	C10	C13	1,392(6)
Fe2	O6	1,951(3)	C10	C11	1,494(6)
Fe2	O6	1,951(3)	C12	C16	1,379(7)
Fe2	O5	2,151(3)	C13	C18	1,392(7)
Fe2	O5	2,151(3)	C14	C19	1,389(8)
O3	C11	1,260(5)	C15	C20	1,373(9)
O4	C8	1,256(4)	C16	C17	1,368(8)
O5	C8	1,277(5)	C17	C18	1,368(8)
O5	Fe1	2,222(3)	C19	C20	1,356(9)
O6	C11	1,264(5)			

Tabelle 106. Winkel/° von Fe(OBz)₂.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O3	Fe1	O3	180,000(1)	Fe2	O5	Fe1	96,33(11)
O3	Fe1	O4	90,04(11)	C11	O6	Fe2	131,4(3)
O3	Fe1	O4	89,96(11)	C9	C7	C14	119,4(4)
O3	Fe1	O4	89,96(11)	C9	C7	C8	120,1(4)
O3	Fe1	O4	90,04(11)	C14	C7	C8	120,4(4)
O4	Fe1	O4	180,00(10)	O4	C8	O5	119,8(4)
O3	Fe1	O5	87,66(11)	O4	C8	C7	120,0(4)
O3	Fe1	O5	92,34(11)	O5	C8	C7	120,1(4)
O4	Fe1	O5	82,98(11)	C15	C9	C7	120,3(5)
O4	Fe1	O5	97,02(11)	C12	C10	C13	119,2(4)
O3	Fe1	O5	92,34(11)	C12	C10	C11	121,4(4)
O3	Fe1	O5	87,66(11)	C13	C10	C11	119,4(4)
O4	Fe1	O5	97,02(11)	O3	C11	O6	123,8(4)
O4	Fe1	O5	82,98(11)	O3	C11	C10	119,5(4)
O5	Fe1	O5	180,00(10)	O6	C11	C10	116,7(4)
O6	Fe2	O6	97,57(18)	C10	C12	C16	120,5(5)
O6	Fe2	O5	97,28(12)	C18	C13	C10	119,8(5)
O6	Fe2	O5	129,94(13)	C19	C14	C7	119,1(6)
O6	Fe2	O5	129,94(13)	C20	C15	C9	119,7(6)
O6	Fe2	O5	97,28(12)	C17	C16	C12	120,0(5)
O5	Fe2	O5	108,64(16)	C18	C17	C16	120,6(5)
C11	O3	Fe1	133,3(3)	C17	C18	C13	119,8(6)
C8	O4	Fe1	148,5(3)	C20	C19	C14	120,9(6)
C8	O5	Fe2	98,5(2)	C19	C20	C15	120,5(6)
C8	O5	Fe1	133,2(3)				

8.5.2 Praseodymbenzoat, $\text{Pr}(\text{OBz})_3$ **Tabelle 107.** Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Pr}(\text{OBz})_3$.

Atom	x	y	z	Ueq
Pr1	0,732280(11)	0,185341(15)	0,746817(13)	0,01875(7)
Pr2	0,756237(11)	0,224429(15)	0,493984(13)	0,01858(7)
O3	0,76784(15)	0,3070(2)	0,65373(19)	0,0245(6)
O4	0,68279(15)	0,3123(2)	0,81885(19)	0,0244(6)
C5	0,8220(2)	0,3600(3)	0,6488(3)	0,0224(7)
O6	0,75754(14)	0,09292(19)	0,62380(17)	0,0220(5)
O7	0,83443(15)	0,2441(2)	0,89760(19)	0,0253(6)
O8	0,71103(16)	0,3698(2)	0,40093(19)	0,0277(6)
O9	0,84925(15)	0,1045(2)	0,5686(2)	0,0286(6)
O10	0,70422(16)	0,0633(2)	0,41537(19)	0,0284(6)
O11	0,86106(17)	0,1506(3)	0,7964(2)	0,0414(8)
O12	0,61804(15)	0,1889(2)	0,63153(19)	0,0270(6)
O13	0,7166(2)	0,4826(2)	0,3026(2)	0,0419(8)
O14	0,63670(15)	0,2309(2)	0,5009(2)	0,0274(6)
O15	0,84349(17)	0,3519(2)	0,5808(2)	0,0338(7)
C16	0,5013(3)	0,5668(4)	0,6507(4)	0,0454(12)
H16	0,4638	0,6029	0,6107	0,043(3)
C17	0,9759(2)	0,2092(3)	1,0271(3)	0,0305(9)
H17	0,9468	0,2545	1,0443	0,043(3)
C18	0,6815(3)	0,7064(4)	0,4729(4)	0,0493(13)
H18	0,6826	0,7726	0,4585	0,043(3)
C19	0,7085(2)	0,4602(3)	0,3777(3)	0,0237(8)
C20	0,8309(2)	-0,0504(3)	0,6294(3)	0,0250(8)
C21	0,5247(2)	0,1576(3)	0,4921(3)	0,0216(7)
C22	0,9528(2)	0,1676(3)	0,9399(3)	0,0242(8)
C23	0,6970(3)	0,6350(3)	0,4164(3)	0,0381(11)
H23	0,7087	0,6532	0,3645	0,043(3)
C24	0,9201(3)	0,5606(4)	0,8635(4)	0,0521(15)
H24	0,9419	0,6036	0,9112	0,043(3)
C25	0,5978(2)	0,1953(3)	0,5451(3)	0,0230(8)
C26	1,0643(2)	0,0757(3)	0,9752(3)	0,0312(9)
H26	1,0941	0,0319	0,9576	0,043(3)
C27	0,6946(2)	0,5367(3)	0,4388(3)	0,0264(8)
C28	0,4790(2)	0,1175(3)	0,5366(3)	0,0267(8)
H28	0,4921	0,1196	0,6002	0,043(3)
C29	0,6783(2)	0,5097(3)	0,5173(3)	0,0283(9)
H29	0,6776	0,4437	0,5327	0,043(3)
C30	0,9973(2)	0,1017(3)	0,9145(3)	0,0259(8)
H30	0,9819	0,0745	0,8561	0,043(3)
C31	0,8129(2)	0,0541(3)	0,6077(2)	0,0221(8)
C32	0,6120(2)	0,4589(3)	0,7711(3)	0,0249(8)
C33	0,8003(2)	-0,1045(3)	0,6836(3)	0,0294(9)
H33	0,769	-0,0745	0,7103	0,043(3)
C34	0,6630(3)	0,5815(4)	0,5726(3)	0,0364(10)
H34	0,6517	0,5639	0,6249	0,043(3)
C35	0,9279(2)	0,4598(3)	0,7392(3)	0,0331(9)
H35	0,9543	0,4359	0,7029	0,043(3)
C36	0,8163(3)	-0,2046(3)	0,6981(3)	0,0354(10)

H36	0,7959	-0,241	0,7349	0,043(3)
C37	0,6698(2)	0,4012(3)	0,8386(3)	0,0227(8)
C38	0,8171(3)	0,4675(4)	0,7778(3)	0,0396(11)
H38	0,7694	0,448	0,7673	0,043(3)
C39	0,4142(2)	0,0747(3)	0,4863(3)	0,0323(9)
H39	0,3837	0,0484	0,5161	0,043(3)
C40	1,0428(3)	0,1826(4)	1,0882(3)	0,0379(11)
H40	1,0584	0,2097	1,1466	0,043(3)
C41	0,8486(3)	0,5329(4)	0,8471(4)	0,0521(15)
H41	0,8221	0,5584	0,8826	0,043(3)
C42	1,0864(2)	0,1160(4)	1,0624(3)	0,0369(10)
H42	1,1308	0,098	1,1039	0,043(3)
C43	0,8785(3)	-0,0961(4)	0,5902(3)	0,0366(10)
H43	0,9001	-0,0598	0,5546	0,043(3)
C44	0,5040(2)	0,1544(3)	0,3966(3)	0,0259(8)
H44	0,5339	0,1817	0,3663	0,043(3)
C45	0,8560(2)	0,4303(3)	0,7234(3)	0,0256(8)
C46	0,3947(2)	0,0706(3)	0,3924(3)	0,0343(10)
H46	0,3514	0,0407	0,3591	0,043(3)
C47	0,6647(3)	0,6789(4)	0,5494(3)	0,0412(11)
H47	0,6542	0,7269	0,5863	0,043(3)
C50	0,6046(3)	0,5586(3)	0,7860(3)	0,0331(10)
H50	0,637	0,5895	0,8363	0,043(3)
C51	0,4395(2)	0,1110(3)	0,3469(3)	0,0334(9)
H51	0,4259	0,1087	0,2833	0,043(3)
C52	0,5642(2)	0,4137(3)	0,6945(3)	0,0322(9)
H52	0,5693	0,3473	0,6835	0,043(3)
C53	0,8936(3)	-0,1953(4)	0,6045(4)	0,0454(12)
H53	0,9248	-0,2258	0,5779	0,043(3)
C54	0,9593(3)	0,5252(4)	0,8099(3)	0,0432(12)
H54	1,007	0,5452	0,8211	0,043(3)
C56	0,5491(3)	0,6118(4)	0,7259(3)	0,0418(12)
H56	0,544	0,6783	0,7363	0,043(3)
C57	0,8621(3)	-0,2491(3)	0,6582(3)	0,0411(11)
H57	0,8721	-0,3158	0,6674	0,043(3)
C58	0,8799(2)	0,1887(3)	0,8749(3)	0,0244(8)
C60	0,5088(3)	0,4683(4)	0,6345(3)	0,0413(11)
H60	0,4768	0,4383	0,5832	0,043(3)

Tabelle 108. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Pr}(\text{OBz})_3$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Pr1	0,02215(11)	0,02104(12)	0,01413(10)	-0,00020(7)	0,00728(8)	0,00055(7)
Pr2	0,02179(11)	0,02047(11)	0,01485(10)	-0,00010(8)	0,00775(8)	-0,00221(7)
O3	0,0268(14)	0,0254(14)	0,0241(14)	-0,0021(11)	0,0122(12)	-0,0066(11)
O4	0,0280(14)	0,0237(14)	0,0240(13)	-0,0019(11)	0,0118(12)	0,0044(11)
C5	0,0259(19)	0,0225(19)	0,0188(17)	-0,0009(15)	0,0074(15)	-0,0016(15)
O6	0,0250(14)	0,0224(14)	0,0195(13)	-0,0013(11)	0,0081(11)	0,0031(11)
O7	0,0241(14)	0,0270(15)	0,0268(14)	0,0018(11)	0,0109(11)	0,0025(11)
O8	0,0379(16)	0,0206(14)	0,0284(14)	0,0025(12)	0,0158(13)	0,0029(12)
O9	0,0274(15)	0,0320(16)	0,0295(14)	0,0077(12)	0,0133(12)	0,0053(12)

O10	0,0343(16)	0,0284(15)	0,0200(13)	0,0019(11)	0,0051(12)	-0,0031(12)
O11	0,0298(16)	0,068(2)	0,0239(15)	-0,0169(16)	0,0050(13)	0,0126(16)
O12	0,0232(14)	0,0357(16)	0,0204(13)	-0,0021(12)	0,0047(11)	0,0002(12)
O13	0,082(3)	0,0264(16)	0,0283(16)	0,0039(13)	0,0333(17)	0,0055(16)
O14	0,0208(13)	0,0334(15)	0,0279(14)	0,0034(12)	0,0076(12)	-0,0001(11)
O15	0,0362(16)	0,0418(18)	0,0286(15)	-0,0116(14)	0,0175(13)	-0,0160(14)
C16	0,042(3)	0,050(3)	0,041(3)	0,020(2)	0,010(2)	0,022(2)
C17	0,026(2)	0,035(2)	0,030(2)	-0,0029(18)	0,0083(18)	-0,0036(17)
C18	0,080(4)	0,023(2)	0,052(3)	-0,001(2)	0,029(3)	0,009(2)
C19	0,027(2)	0,025(2)	0,0206(18)	-0,0036(15)	0,0086(16)	0,0016(15)
C20	0,026(2)	0,026(2)	0,0214(18)	-0,0021(16)	0,0054(16)	0,0041(16)
C21	0,0171(17)	0,0225(19)	0,0236(18)	-0,0020(15)	0,0042(15)	0,0022(14)
C22	0,0228(19)	0,028(2)	0,0241(18)	-0,0024(15)	0,0105(16)	-0,0040(15)
C23	0,060(3)	0,027(2)	0,035(2)	0,0003(19)	0,025(2)	0,003(2)
C24	0,078(4)	0,043(3)	0,032(2)	-0,016(2)	0,013(3)	-0,029(3)
C25	0,027(2)	0,0214(18)	0,0238(18)	-0,0021(15)	0,0120(16)	0,0005(15)
C26	0,027(2)	0,030(2)	0,039(2)	0,0045(18)	0,0148(19)	0,0012(17)
C27	0,031(2)	0,024(2)	0,0231(19)	-0,0014(16)	0,0072(17)	0,0028(16)
C28	0,029(2)	0,029(2)	0,0265(19)	0,0002(16)	0,0144(17)	0,0034(16)
C29	0,034(2)	0,028(2)	0,0248(19)	-0,0001(17)	0,0135(18)	0,0052(17)
C30	0,026(2)	0,027(2)	0,0274(19)	0,0015(16)	0,0131(17)	0,0000(16)
C31	0,0257(19)	0,0247(19)	0,0136(16)	-0,0013(14)	0,0032(15)	0,0015(15)
C32	0,032(2)	0,028(2)	0,0196(17)	0,0058(15)	0,0142(17)	0,0077(16)
C33	0,030(2)	0,030(2)	0,027(2)	0,0022(17)	0,0081(18)	0,0064(17)
C34	0,044(3)	0,038(3)	0,027(2)	-0,0016(19)	0,012(2)	0,010(2)
C35	0,030(2)	0,035(2)	0,034(2)	-0,0042(19)	0,0110(19)	-0,0063(18)
C36	0,042(3)	0,028(2)	0,034(2)	0,0042(18)	0,010(2)	0,0012(19)
C37	0,0239(19)	0,0247(19)	0,0211(17)	0,0060(15)	0,0095(16)	0,0034(15)
C38	0,046(3)	0,043(3)	0,036(2)	-0,014(2)	0,023(2)	-0,015(2)
C39	0,025(2)	0,025(2)	0,049(3)	0,0003(19)	0,015(2)	-0,0007(16)
C40	0,030(2)	0,049(3)	0,029(2)	-0,003(2)	0,0022(19)	-0,005(2)
C41	0,074(4)	0,049(3)	0,044(3)	-0,022(2)	0,034(3)	-0,026(3)
C42	0,025(2)	0,046(3)	0,036(2)	0,005(2)	0,0040(19)	-0,0025(19)
C43	0,039(2)	0,038(3)	0,037(2)	0,001(2)	0,017(2)	0,010(2)
C44	0,026(2)	0,028(2)	0,0238(19)	0,0005(16)	0,0087(16)	0,0037(16)
C45	0,032(2)	0,029(2)	0,0182(17)	-0,0015(16)	0,0113(16)	-0,0080(16)
C46	0,024(2)	0,030(2)	0,045(3)	-0,005(2)	0,0044(19)	-0,0008(17)
C47	0,056(3)	0,035(3)	0,036(2)	-0,011(2)	0,019(2)	0,012(2)
C50	0,044(3)	0,031(2)	0,027(2)	0,0009(18)	0,014(2)	0,0074(19)
C51	0,032(2)	0,034(2)	0,027(2)	-0,0052(18)	-0,0002(18)	0,0034(18)
C52	0,032(2)	0,032(2)	0,030(2)	0,0033(18)	0,0058(18)	0,0054(18)
C53	0,051(3)	0,042(3)	0,048(3)	-0,001(2)	0,023(3)	0,020(2)
C54	0,045(3)	0,042(3)	0,036(2)	-0,005(2)	0,004(2)	-0,018(2)
C56	0,059(3)	0,032(2)	0,037(2)	0,011(2)	0,020(2)	0,022(2)
C57	0,053(3)	0,023(2)	0,042(3)	0,0003(19)	0,008(2)	0,011(2)
C58	0,0237(19)	0,028(2)	0,0247(19)	-0,0032(16)	0,0113(16)	0,0008(15)
C60	0,031(2)	0,050(3)	0,036(2)	0,005(2)	0,001(2)	0,008(2)

Tabelle 109. Atomabstände/Å von Pr(OBz)₃.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Pr1	O12	2,364(3)	C17	C40	1,390(6)
Pr1	O4	2,413(3)	C17	C22	1,393(6)
Pr1	O11	2,422(3)	C18	C47	1,370(7)
Pr1	O3	2,430(3)	C18	C23	1,400(7)
Pr1	O6	2,449(2)	C19	C27	1,485(5)
Pr1	O13	2,496(3)	C19	Pr1	2,965(4)
Pr1	O8	2,642(3)	C20	C33	1,382(6)
Pr1	O7	2,655(3)	C20	C43	1,401(6)
Pr1	C58	2,922(4)	C20	C31	1,479(6)
Pr1	C19	2,965(4)	C21	C28	1,394(5)
Pr1	Pr2	3,8825(4)	C21	C44	1,396(5)
Pr1	Pr2	4,0977(4)	C21	C25	1,489(5)
Pr2	O14	2,362(3)	C22	C30	1,386(5)
Pr2	O9	2,438(3)	C22	C58	1,482(6)
Pr2	O8	2,438(3)	C23	C27	1,387(6)
Pr2	O7	2,475(3)	C24	C54	1,375(8)
Pr2	O15	2,498(3)	C24	C41	1,384(8)
Pr2	O10	2,555(3)	C26	C42	1,385(7)
Pr2	O3	2,647(3)	C26	C30	1,388(6)
Pr2	O4	2,667(3)	C27	C29	1,393(6)
Pr2	O6	2,677(3)	C28	C39	1,382(6)
Pr2	C31	2,905(4)	C29	C34	1,389(6)
Pr2	C5	2,964(4)	C32	C52	1,393(6)
Pr2	C37	2,987(4)	C32	C50	1,393(6)
O3	C5	1,298(5)	C32	C37	1,490(5)
O4	C37	1,292(5)	C33	C36	1,401(6)
O4	Pr2	2,667(3)	C34	C47	1,377(7)
C5	O15	1,248(5)	C35	C54	1,389(6)
C5	C45	1,481(5)	C35	C45	1,400(6)
O6	C31	1,291(5)	C36	C57	1,373(7)
O7	C58	1,292(5)	C37	O10	1,255(5)
O7	Pr2	2,475(3)	C37	Pr2	2,987(4)
O8	C19	1,279(5)	C38	C41	1,375(7)
O8	Pr1	2,642(3)	C38	C45	1,390(6)
O9	C31	1,266(5)	C39	C46	1,374(7)
O10	C37	1,255(5)	C40	C42	1,382(7)
O11	C58	1,258(5)	C43	C53	1,386(7)
O12	C25	1,265(5)	C44	C51	1,379(6)
O13	C19	1,253(5)	C46	C51	1,392(7)
O13	Pr1	2,496(3)	C50	C56	1,383(6)
O14	C25	1,264(5)	C52	C60	1,391(6)
C16	C56	1,378(8)	C53	C57	1,385(8)
C16	C60	1,382(8)			

Tabelle 110. Winkel/° von Pr(OBz)₃.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O12	Pr1	O4	85,02(10)	O4	Pr2	C5	152,30(10)
O12	Pr1	O11	150,74(10)	O6	Pr2	C5	85,25(9)
O4	Pr1	O11	121,24(10)	C31	Pr2	C5	91,63(10)
O12	Pr1	O3	85,34(10)	O14	Pr2	C37	75,25(10)
O4	Pr1	O3	90,67(10)	O9	Pr2	C37	97,96(11)
O11	Pr1	O3	81,95(12)	O8	Pr2	C37	89,33(10)
O12	Pr1	O6	78,56(9)	O7	Pr2	C37	85,20(9)
O4	Pr1	O6	158,49(9)	O15	Pr2	C37	160,18(10)
O11	Pr1	O6	72,68(9)	O10	Pr2	C37	24,63(10)
O3	Pr1	O6	74,35(9)	O3	Pr2	C37	147,92(9)
O12	Pr1	O13	95,09(12)	O4	Pr2	C37	25,64(10)
O4	Pr1	O13	112,88(10)	O6	Pr2	C37	94,81(9)
O11	Pr1	O13	86,53(13)	C31	Pr2	C37	91,98(11)
O3	Pr1	O13	156,42(10)	C5	Pr2	C37	171,88(10)
O6	Pr1	O13	82,60(9)	C5	O3	Pr1	143,3(2)
O12	Pr1	O8	107,60(10)	C5	O3	Pr2	90,8(2)
O4	Pr1	O8	65,95(9)	Pr1	O3	Pr2	107,56(10)
O11	Pr1	O8	95,86(10)	C37	O4	Pr1	156,3(2)
O3	Pr1	O8	151,37(9)	C37	O4	Pr2	91,1(2)
O6	Pr1	O8	132,43(9)	Pr1	O4	Pr2	99,55(9)
O13	Pr1	O8	50,20(9)	O15	C5	O3	119,6(3)
O12	Pr1	O7	156,15(9)	O15	C5	C45	121,4(3)
O4	Pr1	O7	71,29(9)	O3	C5	C45	119,0(3)
O11	Pr1	O7	51,04(9)	O15	C5	Pr2	56,3(2)
O3	Pr1	O7	92,06(9)	O3	C5	Pr2	63,25(19)
O6	Pr1	O7	123,55(8)	C45	C5	Pr2	177,5(3)
O13	Pr1	O7	96,60(10)	C31	O6	Pr1	137,9(2)
O8	Pr1	O7	65,65(9)	C31	O6	Pr2	86,7(2)
O12	Pr1	C58	173,99(10)	Pr1	O6	Pr2	106,03(9)
O4	Pr1	C58	97,39(10)	C58	O7	Pr2	150,1(3)
O11	Pr1	C58	25,05(10)	C58	O7	Pr1	88,5(2)
O3	Pr1	C58	89,12(10)	Pr2	O7	Pr1	98,30(9)
O6	Pr1	C58	97,72(10)	C19	O8	Pr2	157,0(3)
O13	Pr1	C58	89,06(12)	C19	O8	Pr1	91,5(2)
O8	Pr1	C58	78,40(10)	Pr2	O8	Pr1	99,60(9)
O7	Pr1	C58	26,24(10)	C31	O9	Pr2	98,3(2)
O12	Pr1	C19	102,25(11)	C37	O10	Pr2	97,3(2)
O4	Pr1	C19	89,78(10)	C58	O11	Pr1	100,3(2)
O11	Pr1	C19	91,34(12)	C25	O12	Pr1	134,1(3)
O3	Pr1	C19	172,41(10)	C19	O13	Pr1	99,1(2)
O6	Pr1	C19	107,12(10)	C25	O14	Pr2	140,9(3)
O13	Pr1	C19	24,66(10)	C5	O15	Pr2	99,1(2)
O8	Pr1	C19	25,54(10)	C56	C16	C60	120,1(4)
O7	Pr1	C19	80,91(10)	C40	C17	C22	119,5(4)
C58	Pr1	C19	83,31(11)	C47	C18	C23	120,1(5)
O12	Pr1	Pr2	121,41(7)	O13	C19	O8	119,2(3)
O4	Pr1	Pr2	42,65(7)	O13	C19	C27	121,0(4)
O11	Pr1	Pr2	87,84(7)	O8	C19	C27	119,8(3)
O3	Pr1	Pr2	113,19(7)	O13	C19	Pr1	56,2(2)
O6	Pr1	Pr2	158,24(6)	O8	C19	Pr1	62,99(19)
O13	Pr1	Pr2	86,73(7)	C27	C19	Pr1	176,8(3)

O8	Pr1	Pr2	38,25(6)	C33	C20	C43	119,6(4)
O7	Pr1	Pr2	39,11(6)	C33	C20	C31	122,1(4)
C58	Pr1	Pr2	63,08(7)	C43	C20	C31	118,2(4)
C19	Pr1	Pr2	62,74(8)	C28	C21	C44	119,4(4)
O12	Pr1	Pr2	69,35(7)	C28	C21	C25	120,8(4)
O4	Pr1	Pr2	121,67(7)	C44	C21	C25	119,6(3)
O11	Pr1	Pr2	84,67(8)	C30	C22	C17	119,7(4)
O3	Pr1	Pr2	38,02(6)	C30	C22	C58	118,9(4)
O6	Pr1	Pr2	38,90(6)	C17	C22	C58	121,3(4)
O13	Pr1	Pr2	120,59(7)	C27	C23	C18	119,0(4)
O8	Pr1	Pr2	170,60(6)	C54	C24	C41	120,7(5)
O7	Pr1	Pr2	120,80(6)	O14	C25	O12	123,5(4)
C58	Pr1	Pr2	104,79(8)	O14	C25	C21	117,9(3)
C19	Pr1	Pr2	145,21(8)	O12	C25	C21	118,5(3)
Pr2	Pr1	Pr2	151,022(7)	C42	C26	C30	119,2(4)
O14	Pr2	O9	126,70(10)	C23	C27	C29	120,4(4)
O14	Pr2	O8	79,60(10)	C23	C27	C19	119,5(4)
O9	Pr2	O8	153,69(9)	C29	C27	C19	120,1(4)
O14	Pr2	O7	145,18(10)	C39	C28	C21	119,9(4)
O9	Pr2	O7	83,87(9)	C34	C29	C27	119,8(4)
O8	Pr2	O7	71,52(9)	C22	C30	C26	120,8(4)
O14	Pr2	O15	117,46(10)	O9	C31	O6	119,6(3)
O9	Pr2	O15	86,38(11)	O9	C31	C20	120,0(3)
O8	Pr2	O15	78,89(11)	O6	C31	C20	120,3(3)
O7	Pr2	O15	76,01(9)	O9	C31	Pr2	56,14(19)
O14	Pr2	O10	78,80(10)	O6	C31	Pr2	66,95(19)
O9	Pr2	O10	76,75(10)	C20	C31	Pr2	157,3(3)
O8	Pr2	O10	113,85(10)	C52	C32	C50	119,6(4)
O7	Pr2	O10	95,23(9)	C52	C32	C37	120,8(4)
O15	Pr2	O10	161,81(10)	C50	C32	C37	119,6(4)
O14	Pr2	O3	74,79(9)	C20	C33	C36	119,9(4)
O9	Pr2	O3	90,86(9)	C47	C34	C29	119,5(4)
O8	Pr2	O3	96,28(9)	C54	C35	C45	119,1(4)
O7	Pr2	O3	126,54(9)	C57	C36	C33	120,1(4)
O15	Pr2	O3	50,55(9)	O10	C37	O4	119,8(3)
O10	Pr2	O3	135,15(8)	O10	C37	C32	120,9(4)
O14	Pr2	O4	80,40(9)	O4	C37	C32	119,3(3)
O9	Pr2	O4	115,46(9)	O10	C37	Pr2	58,0(2)
O8	Pr2	O4	65,23(9)	O4	C37	Pr2	63,23(19)
O7	Pr2	O4	70,17(9)	C32	C37	Pr2	165,7(3)
O15	Pr2	O4	136,58(9)	C41	C38	C45	120,6(5)
O10	Pr2	O4	49,87(8)	C46	C39	C28	120,4(4)
O3	Pr2	O4	151,51(8)	C42	C40	C17	120,3(4)
O14	Pr2	O6	76,58(9)	C38	C41	C24	119,5(5)
O9	Pr2	O6	50,95(8)	C40	C42	C26	120,5(4)
O8	Pr2	O6	153,88(8)	C53	C43	C20	120,0(4)
O7	Pr2	O6	134,49(9)	C51	C44	C21	120,3(4)
O15	Pr2	O6	102,80(9)	C38	C45	C35	119,7(4)
O10	Pr2	O6	71,78(8)	C38	C45	C5	120,6(4)
O3	Pr2	O6	67,25(8)	C35	C45	C5	119,8(4)
O4	Pr2	O6	120,25(8)	C39	C46	C51	120,4(4)
O14	Pr2	C31	101,14(10)	C18	C47	C34	121,2(4)
O9	Pr2	C31	25,56(10)	C56	C50	C32	120,1(4)
O8	Pr2	C31	178,62(11)	C44	C51	C46	119,7(4)

O7	Pr2	C31	108,17(10)	C60	C52	C32	119,6(4)
O15	Pr2	C31	99,73(11)	C57	C53	C43	120,0(4)
O10	Pr2	C31	67,48(10)	C24	C54	C35	120,4(5)
O3	Pr2	C31	82,82(9)	C16	C56	C50	120,3(5)
O4	Pr2	C31	116,00(9)	C36	C57	C53	120,4(4)
O6	Pr2	C31	26,35(9)	O11	C58	O7	119,0(4)
O14	Pr2	C5	96,91(10)	O11	C58	C22	119,6(3)
O9	Pr2	C5	88,41(10)	O7	C58	C22	121,3(3)
O8	Pr2	C5	87,12(10)	O11	C58	Pr1	54,6(2)
O7	Pr2	C5	100,57(10)	O7	C58	Pr1	65,3(2)
O15	Pr2	C5	24,57(10)	C22	C58	Pr1	167,9(3)
O10	Pr2	C5	157,02(10)	C16	C60	C52	120,3(5)
O3	Pr2	C5	25,97(9)				

8.5.3 Gadoliniumbenzoat, $\text{Gd}(\text{OBz})_3$

Tabelle 111. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

Atom	x	y	z	Ueq
Gd1	0,03426(2)	0,068587(12)	0,766678(13)	0,04367(8)
Gd2	0,14085(2)	0,228386(12)	0,824024(13)	0,04535(8)
Gd3	0,33688(2)	0,386562(12)	0,786026(14)	0,04870(9)
O4	0,2809(4)	0,31897(19)	0,8578(2)	0,0628(11)
O5	0,1763(3)	0,11689(18)	0,83144(18)	0,0539(10)
O6	0,0684(3)	0,17404(17)	0,73843(17)	0,0523(9)
O7	0,1837(4)	0,0427(2)	0,7131(2)	0,0696(12)
O8	0,4578(4)	0,49942(19)	0,6576(2)	0,0657(11)
O9	0,2436(4)	0,17382(19)	0,9046(2)	0,0670(12)
O10	-0,0536(4)	0,12191(19)	0,68052(19)	0,0620(11)
O11	0,1378(4)	0,29260(19)	0,9090(2)	0,0646(11)
O12	-0,1022(3)	0,11268(18)	0,8201(2)	0,0623(11)
O13	0,5772(4)	0,49776(19)	0,7838(2)	0,0648(11)
C14	0,4888(5)	0,2075(3)	0,7396(3)	0,0566(15)
O15	0,1494(4)	0,3781(3)	0,7494(2)	0,0849(15)
O16	0,3028(4)	0,2196(2)	0,7737(2)	0,0716(13)
O17	-0,0347(3)	0,1988(2)	0,8554(2)	0,0662(12)
C18	-0,4426(7)	0,1945(5)	0,9130(4)	0,100(3)
H18	-0,517	0,2033	0,9237	0,122(5)
O19	0,0415(4)	0,3028(2)	0,7730(2)	0,0706(12)
O20	0,2265(5)	-0,0356(2)	0,6606(2)	0,0771(13)
O21	0,3735(4)	0,4252(2)	0,6992(2)	0,0702(12)
C22	0,2550(5)	0,0585(3)	0,6202(3)	0,0554(15)
O23	0,3995(5)	0,29915(19)	0,7526(3)	0,0835(16)
O24	0,5249(3)	0,4113(2)	0,8181(2)	0,0756(14)
C25	0,4240(5)	0,4467(3)	0,6573(3)	0,0572(15)
C26	0,7240(5)	0,4385(2)	0,8342(3)	0,0488(13)
C27	0,4423(5)	0,4086(3)	0,6055(3)	0,0539(14)
C28	0,3909(5)	0,2446(3)	0,7572(3)	0,0594(15)
C29	-0,0511(5)	0,3819(3)	0,7198(3)	0,0515(14)
C30	0,5997(5)	0,4500(3)	0,8106(3)	0,0547(14)

C31	0,2291(5)	0,3222(3)	0,9053(3)	0,0543(14)
C32	-0,1410(10)	0,4684(4)	0,6770(5)	0,114(3)
H32	-0,1361	0,5081	0,667	0,122(5)
C33	0,0012(6)	0,2164(3)	0,6448(3)	0,0599(15)
C34	0,0530(5)	0,3522(3)	0,7497(3)	0,0579(15)
C35	0,0040(5)	0,1687(3)	0,6893(3)	0,0516(14)
C36	0,8034(6)	0,4840(3)	0,8384(3)	0,0720(19)
H36	0,7804	0,5219	0,8266	0,122(5)
C37	-0,3564(10)	0,2347(5)	0,9199(7)	0,162(6)
H37	-0,3694	0,2704	0,9383	0,122(5)
C38	0,2192(5)	0,0195(3)	0,6676(3)	0,0579(15)
C39	0,2808(5)	0,0701(3)	0,9136(3)	0,0559(15)
C40	0,2316(5)	0,1227(3)	0,8825(3)	0,0528(14)
C41	0,2780(6)	0,3603(3)	0,9546(3)	0,0649(17)
C42	0,2933(7)	0,0697(4)	0,9751(3)	0,080(2)
H42	0,2763	0,1033	0,9962	0,122(5)
C43	-0,1133(5)	0,1597(3)	0,8480(3)	0,0537(14)
C44	-0,2280(5)	0,1711(3)	0,8728(3)	0,0556(15)
C45	0,4350(8)	0,3475(3)	0,6098(4)	0,088(2)
H45	0,4117	0,33	0,6438	0,122(5)
C46	0,6806(7)	0,1983(5)	0,7092(6)	0,130(5)
H46	0,749	0,2162	0,6992	0,122(5)
C47	0,7614(6)	0,3826(3)	0,8518(3)	0,0709(18)
H47	0,7087	0,3513	0,8502	0,122(5)
C48	0,2870(7)	0,0341(4)	0,5681(3)	0,081(2)
H48	0,2861	-0,0067	0,5631	0,122(5)
C49	0,3200(11)	0,0701(4)	0,5240(4)	0,113(3)
H49	0,3413	0,0537	0,4891	0,122(5)
C50	-0,0924(8)	0,2199(4)	0,6015(3)	0,083(2)
H50	-0,1519	0,1918	0,5999	0,122(5)
C51	0,4746(7)	0,4328(4)	0,5543(3)	0,080(2)
H51	0,4832	0,4736	0,5515	0,122(5)
C52	0,8780(7)	0,3732(4)	0,8718(4)	0,080(2)
H52	0,9031	0,3353	0,8825	0,122(5)
C53	0,0907(6)	0,2573(3)	0,6458(3)	0,0648(17)
H53	0,1537	0,2548	0,6744	0,122(5)
C54	0,3116(5)	0,0211(3)	0,8834(3)	0,0670(17)
H54	0,3036	0,0214	0,8424	0,122(5)
C55	-0,3131(7)	0,1304(4)	0,8706(4)	0,098(3)
H55	-0,2994	0,0932	0,8552	0,122(5)
C56	0,3544(7)	-0,0290(4)	0,9129(5)	0,088(2)
H56	0,3788	-0,0614	0,892	0,122(5)
C57	0,2061(8)	0,3757(3)	0,9983(3)	0,079(2)
H57	0,1299	0,3614	0,9967	0,122(5)
C58	0,5904(7)	0,2328(3)	0,7271(5)	0,096(3)
H58	0,5998	0,2736	0,7305	0,122(5)
C59	-0,0961(10)	0,2660(4)	0,5604(4)	0,101(3)
H59	-0,1589	0,2691	0,5317	0,122(5)
C60	0,0865(9)	0,3022(3)	0,6040(4)	0,088(2)
H60	0,1476	0,3293	0,6043	0,122(5)
C61	0,2564(7)	0,1190(3)	0,6266(4)	0,088(3)
H61	0,235	0,1361	0,6611	0,122(5)
C62	-0,1539(6)	0,3526(4)	0,7062(4)	0,086(2)
H62	-0,1598	0,313	0,7165	0,122(5)

C63	-0,0072(10)	0,3068(4)	0,5624(4)	0,097(3)
H63	-0,0105	0,3377	0,5354	0,122(5)
C64	-0,2424(9)	0,4387(5)	0,6639(4)	0,107(3)
H64	-0,3072	0,4582	0,6455	0,122(5)
C65	0,9186(6)	0,4731(4)	0,8603(4)	0,090(3)
H65	0,9717	0,5042	0,8643	0,122(5)
C66	0,4946(9)	0,3973(4)	0,5069(4)	0,098(3)
H66	0,5118	0,4143	0,4715	0,122(5)
C67	-0,0461(7)	0,4407(3)	0,7050(4)	0,083(2)
H67	0,0228	0,4618	0,7141	0,122(5)
C68	0,4788(7)	0,1474(3)	0,7388(4)	0,084(2)
H68	0,4108	0,1294	0,7493	0,122(5)
C69	0,4342(11)	0,4158(5)	1,0037(6)	0,124(4)
H69	0,5116	0,4286	1,0066	0,122(5)
C70	0,3321(9)	0,0179(5)	1,0042(5)	0,114(3)
H70	0,3386	0,0164	1,0452	0,122(5)
C71	0,9543(6)	0,4178(4)	0,8759(3)	0,077(2)
H71	1,0321	0,4109	0,8895	0,122(5)
C72	0,3216(11)	0,1302(5)	0,5315(5)	0,125(4)
H72	0,3447	0,1545	0,5018	0,122(5)
C73	0,3909(8)	0,3805(4)	0,9569(4)	0,092(3)
H73	0,4381	0,3707	0,9273	0,122(5)
C74	-0,2496(7)	0,3810(5)	0,6773(5)	0,112(3)
H74	-0,3185	0,3602	0,6672	0,122(5)
C75	0,6698(8)	0,1390(5)	0,7062(6)	0,122(4)
H75	0,7296	0,116	0,6932	0,122(5)
C76	0,5709(9)	0,1131(4)	0,7223(5)	0,114(3)
H76	0,5646	0,0721	0,7223	0,122(5)
C77	-0,4202(7)	0,1422(5)	0,8907(5)	0,110(3)
H77	-0,4776	0,113	0,8885	0,122(5)
C78	0,4624(11)	0,3129(4)	0,5634(5)	0,122(4)
H78	0,4627	0,272	0,5672	0,122(5)
C79	0,2899(11)	0,1543(4)	0,5815(5)	0,129(4)
H79	0,2905	0,1952	0,5859	0,122(5)
C80	0,4891(10)	0,3377(5)	0,5121(5)	0,113(3)
H80	0,5037	0,3137	0,4804	0,122(5)
C81	-0,2481(8)	0,2234(4)	0,8997(6)	0,132(5)
H81	-0,189	0,2516	0,9047	0,122(5)
C82	0,3602(9)	-0,0304(5)	0,9727(5)	0,111(3)
H82	0,3838	-0,0649	0,9925	0,122(5)
C83	0,3609(16)	0,4319(5)	1,0460(5)	0,138(5)
H83	0,3892	0,4567	1,0766	0,122(5)
C84	0,2482(14)	0,4122(5)	1,0441(4)	0,123(4)
H84	0,2004	0,4232	1,0731	0,122(5)

Tabelle 112. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Gd}(\text{OBz})_3$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Gd1	0,04354(14)	0,03780(14)	0,04988(16)	-0,00156(12)	0,00554(11)	-0,00192(11)
Gd2	0,04141(14)	0,03915(14)	0,05605(17)	-0,00136(12)	0,00749(11)	-0,00203(11)
Gd3	0,04428(14)	0,03943(14)	0,06308(19)	-0,00002(13)	0,00861(12)	-0,00174(11)
O4	0,068(3)	0,060(3)	0,062(3)	0,005(2)	0,012(2)	0,006(2)
O5	0,052(2)	0,053(2)	0,055(2)	0,0006(19)	-0,0076(18)	-0,0072(18)
O6	0,061(2)	0,045(2)	0,050(2)	-0,0010(18)	-0,0016(19)	-0,0079(18)
O7	0,056(2)	0,095(3)	0,061(3)	-0,001(3)	0,028(2)	0,007(2)
O8	0,080(3)	0,047(2)	0,069(3)	-0,014(2)	0,001(2)	0,010(2)
O9	0,072(3)	0,053(3)	0,073(3)	-0,007(2)	-0,012(2)	0,004(2)
O10	0,067(3)	0,054(3)	0,061(3)	0,008(2)	-0,010(2)	-0,009(2)
O11	0,071(3)	0,055(2)	0,068(3)	-0,010(2)	0,010(2)	-0,005(2)
O12	0,056(2)	0,051(2)	0,084(3)	-0,012(2)	0,026(2)	0,0017(19)
O13	0,062(2)	0,050(2)	0,079(3)	0,010(2)	-0,010(2)	0,015(2)
C14	0,047(3)	0,050(3)	0,074(4)	-0,010(3)	0,010(3)	0,008(3)
O15	0,044(2)	0,108(4)	0,100(4)	-0,003(3)	-0,007(2)	-0,006(2)
O16	0,052(2)	0,065(3)	0,104(4)	-0,019(3)	0,039(2)	-0,011(2)
O17	0,046(2)	0,067(3)	0,089(3)	-0,007(2)	0,025(2)	-0,016(2)
C18	0,061(5)	0,143(9)	0,102(7)	0,007(6)	0,036(4)	0,016(5)
O19	0,084(3)	0,049(3)	0,076(3)	0,001(2)	-0,009(2)	0,019(2)
O20	0,099(4)	0,051(3)	0,085(3)	0,016(2)	0,026(3)	-0,002(2)
O21	0,082(3)	0,076(3)	0,055(3)	0,005(2)	0,021(2)	0,008(2)
C22	0,062(3)	0,047(3)	0,059(4)	0,007(3)	0,018(3)	0,005(3)
O23	0,100(4)	0,038(2)	0,121(4)	0,001(3)	0,059(3)	0,014(2)
O24	0,041(2)	0,076(3)	0,106(4)	0,018(3)	-0,011(2)	-0,016(2)
C25	0,056(3)	0,058(4)	0,056(4)	-0,002(3)	-0,001(3)	0,010(3)
C26	0,047(3)	0,043(3)	0,055(3)	0,005(3)	0,000(2)	0,002(2)
C27	0,057(3)	0,052(3)	0,053(4)	-0,009(3)	0,005(3)	-0,006(3)
C28	0,056(3)	0,058(4)	0,066(4)	-0,005(3)	0,013(3)	0,001(3)
C29	0,050(3)	0,048(3)	0,057(4)	0,004(3)	0,004(3)	0,005(2)
C30	0,049(3)	0,050(3)	0,063(4)	-0,001(3)	-0,002(3)	0,003(3)
C31	0,061(3)	0,049(3)	0,052(4)	0,005(3)	-0,001(3)	0,007(3)
C32	0,139(9)	0,073(6)	0,124(8)	0,029(6)	-0,025(7)	0,021(6)
C33	0,077(4)	0,047(3)	0,056(4)	0,002(3)	0,009(3)	0,003(3)
C34	0,056(4)	0,053(4)	0,062(4)	-0,012(3)	-0,003(3)	0,007(3)
C35	0,055(3)	0,047(3)	0,053(4)	0,001(3)	0,007(3)	0,003(3)
C36	0,060(4)	0,067(4)	0,086(5)	0,013(4)	-0,008(3)	-0,002(3)
C37	0,116(8)	0,097(7)	0,291(18)	-0,049(9)	0,117(10)	0,005(6)
C38	0,045(3)	0,065(4)	0,064(4)	0,008(3)	0,005(3)	0,001(3)
C39	0,046(3)	0,055(3)	0,065(4)	0,007(3)	-0,002(3)	-0,004(3)
C40	0,044(3)	0,054(4)	0,059(4)	0,001(3)	0,001(3)	0,000(3)
C41	0,085(5)	0,050(4)	0,057(4)	0,004(3)	-0,009(3)	-0,007(3)
C42	0,084(5)	0,088(5)	0,065(5)	0,003(4)	-0,008(4)	0,013(4)
C43	0,046(3)	0,051(3)	0,066(4)	0,004(3)	0,013(3)	0,003(3)
C44	0,042(3)	0,053(3)	0,075(4)	0,001(3)	0,020(3)	-0,001(2)
C45	0,127(7)	0,063(5)	0,080(5)	-0,019(4)	0,035(5)	-0,028(4)
C46	0,061(5)	0,108(7)	0,230(13)	-0,065(8)	0,068(6)	-0,017(5)
C47	0,065(4)	0,056(4)	0,091(5)	0,002(4)	0,004(4)	0,012(3)
C48	0,116(6)	0,068(5)	0,062(5)	0,003(4)	0,028(4)	0,007(4)
C49	0,181(10)	0,091(7)	0,076(6)	0,011(5)	0,056(6)	0,007(6)
C50	0,104(6)	0,071(5)	0,069(5)	0,014(4)	-0,017(4)	0,002(4)

C51	0,109(6)	0,069(5)	0,064(5)	-0,001(4)	0,018(4)	0,001(4)
C52	0,074(5)	0,080(5)	0,084(5)	0,007(4)	-0,007(4)	0,038(4)
C53	0,081(4)	0,049(4)	0,065(4)	0,006(3)	0,017(3)	0,001(3)
C54	0,059(4)	0,055(4)	0,085(5)	0,000(4)	-0,002(3)	0,003(3)
C55	0,071(5)	0,085(5)	0,145(8)	-0,045(6)	0,046(5)	-0,031(4)
C56	0,081(5)	0,062(5)	0,117(8)	0,010(5)	-0,004(5)	0,016(4)
C57	0,120(6)	0,066(5)	0,050(4)	-0,002(3)	0,008(4)	0,011(4)
C58	0,072(4)	0,059(4)	0,164(9)	-0,025(5)	0,052(5)	-0,008(4)
C59	0,142(8)	0,085(6)	0,071(5)	0,014(5)	-0,023(5)	0,014(6)
C60	0,130(7)	0,056(4)	0,082(6)	0,007(4)	0,034(5)	-0,003(4)
C61	0,114(6)	0,054(4)	0,104(6)	-0,002(4)	0,056(5)	-0,004(4)
C62	0,064(4)	0,076(5)	0,115(7)	0,019(5)	-0,018(4)	-0,010(4)
C63	0,150(9)	0,068(5)	0,073(6)	0,021(4)	0,014(6)	0,004(5)
C64	0,097(7)	0,132(9)	0,088(6)	0,028(6)	-0,004(5)	0,053(6)
C65	0,058(4)	0,101(6)	0,107(7)	0,010(5)	-0,017(4)	-0,015(4)
C66	0,141(8)	0,095(7)	0,065(5)	-0,014(5)	0,036(5)	-0,012(6)
C67	0,092(5)	0,061(4)	0,092(6)	0,013(4)	-0,011(4)	-0,005(4)
C68	0,080(5)	0,063(5)	0,116(7)	-0,013(4)	0,035(5)	0,001(4)
C69	0,143(9)	0,113(8)	0,106(8)	0,006(7)	-0,040(7)	-0,051(7)
C70	0,130(8)	0,128(9)	0,080(6)	0,033(6)	-0,015(6)	0,028(7)
C71	0,054(4)	0,104(6)	0,071(5)	-0,002(4)	-0,003(3)	0,018(4)
C72	0,188(11)	0,088(7)	0,111(8)	0,029(6)	0,074(8)	-0,003(7)
C73	0,103(6)	0,084(5)	0,082(6)	0,008(5)	-0,023(5)	-0,028(5)
C74	0,054(4)	0,141(9)	0,134(8)	0,040(7)	-0,024(5)	-0,006(5)
C75	0,069(5)	0,099(7)	0,203(12)	-0,072(8)	0,035(6)	0,005(5)
C76	0,103(7)	0,064(5)	0,179(11)	-0,028(6)	0,040(7)	0,026(5)
C77	0,062(5)	0,141(9)	0,135(8)	-0,039(7)	0,043(5)	-0,039(5)
C78	0,190(11)	0,067(5)	0,118(8)	-0,040(6)	0,057(8)	-0,034(6)
C79	0,188(11)	0,057(5)	0,159(10)	0,024(6)	0,097(9)	0,005(6)
C80	0,160(9)	0,096(7)	0,088(7)	-0,041(6)	0,042(6)	-0,017(6)
C81	0,097(6)	0,074(6)	0,237(14)	-0,046(7)	0,087(8)	-0,015(5)
C82	0,114(7)	0,089(7)	0,126(9)	0,037(7)	-0,006(6)	0,028(6)
C83	0,237(16)	0,095(8)	0,071(7)	-0,008(6)	-0,051(9)	-0,036(9)
C84	0,214(14)	0,091(7)	0,059(6)	-0,014(5)	-0,009(7)	-0,003(8)

Tabelle 113. Atomabstände/Å von Gd(OBz)₃.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Gd1	O7	2,271(4)	C26	C36	1,371(9)
Gd1	O13	2,292(4)	C26	C47	1,383(8)
Gd1	O12	2,297(4)	C26	C30	1,500(8)
Gd1	O8	2,325(4)	C27	C51	1,370(9)
Gd1	O5	2,363(4)	C27	C45	1,388(10)
Gd1	O10	2,441(4)	C29	C62	1,362(9)
Gd1	O6	2,510(4)	C29	C67	1,375(9)
Gd1	C35	2,871(6)	C29	C34	1,479(8)
Gd1	Gd2	3,9961(4)	C31	C41	1,484(9)
Gd2	O16	2,280(4)	C32	C64	1,353(14)
Gd2	O19	2,289(4)	C32	C67	1,363(12)
Gd2	O17	2,297(4)	C33	C53	1,380(9)
Gd2	O6	2,389(4)	C33	C50	1,391(10)

Gd2	O11	2,423(4)	C33	C35	1,480(8)
Gd2	O9	2,426(4)	C36	C65	1,390(10)
Gd2	O5	2,557(4)	C37	C81	1,387(12)
Gd2	O4	2,672(5)	C39	C54	1,368(9)
Gd2	C40	2,883(6)	C39	C42	1,395(10)
Gd2	C31	2,934(6)	C39	C40	1,472(8)
Gd3	O21	2,237(5)	C41	C73	1,370(11)
Gd3	O15	2,241(4)	C41	C57	1,396(10)
Gd3	O23	2,259(4)	C42	C70	1,400(12)
Gd3	O24	2,281(4)	C43	C44	1,501(8)
Gd3	O20	2,295(4)	C44	C55	1,340(9)
Gd3	O4	2,369(4)	C44	C81	1,362(10)
O4	C31	1,285(7)	C45	C78	1,374(11)
O5	C40	1,279(7)	C46	C75	1,349(13)
O6	C35	1,290(7)	C46	C58	1,387(10)
O7	C38	1,263(8)	C47	C52	1,388(10)
O8	C25	1,253(8)	C48	C49	1,373(11)
O8	Gd1	2,325(4)	C49	C72	1,369(13)
O9	C40	1,263(7)	C50	C59	1,400(11)
O10	C35	1,253(7)	C51	C66	1,383(11)
O11	C31	1,252(7)	C52	C71	1,332(11)
O12	C43	1,252(7)	C53	C60	1,391(10)
O13	C30	1,255(7)	C54	C56	1,384(10)
O13	Gd1	2,292(4)	C55	C77	1,376(11)
C14	C58	1,351(9)	C56	C82	1,359(13)
C14	C68	1,365(9)	C57	C84	1,382(12)
C14	C28	1,486(8)	C59	C63	1,372(13)
O15	C34	1,252(8)	C60	C63	1,369(13)
O16	C28	1,246(7)	C61	C79	1,382(12)
O17	C43	1,263(7)	C62	C74	1,384(11)
C18	C77	1,321(13)	C64	C74	1,346(14)
C18	C37	1,342(14)	C65	C71	1,353(11)
O19	C34	1,250(8)	C66	C80	1,356(13)
O20	C38	1,260(8)	C68	C76	1,390(10)
O20	Gd3	2,295(4)	C69	C83	1,385(18)
O21	C25	1,261(8)	C69	C73	1,388(13)
C22	C61	1,378(9)	C70	C82	1,362(14)
C22	C48	1,388(9)	C72	C79	1,344(14)
C22	C38	1,481(9)	C75	C76	1,357(13)
O23	C28	1,243(7)	C78	C80	1,357(13)
O24	C30	1,249(7)	C83	C84	1,364(18)
C25	C27	1,493(9)			

Tabelle 114. Winkel/° von Gd(OBz)₃.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O7	Gd1	O13	87,90(17)	C31	O11	Gd2	101,1(4)
O7	Gd1	O12	169,03(17)	C43	O12	Gd1	138,1(4)
O13	Gd1	O12	101,16(16)	C30	O13	Gd1	157,8(4)
O7	Gd1	O8	104,21(17)	C58	C14	C68	119,5(6)
O13	Gd1	O8	83,35(16)	C58	C14	C28	120,4(6)

O12	Gd1	O8	83,17(17)	C68	C14	C28	120,0(6)
O7	Gd1	O5	86,78(16)	C34	O15	Gd3	148,8(5)
O13	Gd1	O5	163,19(15)	C28	O16	Gd2	146,4(4)
O12	Gd1	O5	86,15(15)	C43	O17	Gd2	142,9(4)
O8	Gd1	O5	82,52(15)	C77	C18	C37	118,9(8)
O7	Gd1	O10	88,36(16)	C34	O19	Gd2	143,7(4)
O13	Gd1	O10	76,80(15)	C38	O20	Gd3	131,6(4)
O12	Gd1	O10	87,73(16)	C25	O21	Gd3	163,4(4)
O8	Gd1	O10	156,12(15)	C61	C22	C48	118,9(6)
O5	Gd1	O10	118,94(14)	C61	C22	C38	121,1(6)
O7	Gd1	O6	87,93(16)	C48	C22	C38	120,1(6)
O13	Gd1	O6	128,93(14)	C28	O23	Gd3	144,1(4)
O12	Gd1	O6	81,58(14)	C30	O24	Gd3	140,3(4)
O8	Gd1	O6	146,43(14)	O8	C25	O21	121,8(6)
O5	Gd1	O6	66,80(13)	O8	C25	C27	119,2(6)
O10	Gd1	O6	52,21(13)	O21	C25	C27	119,0(6)
O7	Gd1	C35	85,84(17)	C36	C26	C47	118,6(6)
O13	Gd1	C35	102,26(17)	C36	C26	C30	119,8(5)
O12	Gd1	C35	86,19(16)	C47	C26	C30	121,5(5)
O8	Gd1	C35	168,78(17)	C51	C27	C45	118,8(6)
O5	Gd1	C35	93,25(16)	C51	C27	C25	120,7(6)
O10	Gd1	C35	25,70(15)	C45	C27	C25	120,4(6)
O6	Gd1	C35	26,67(14)	O23	C28	O16	123,3(6)
O7	Gd1	Gd2	100,71(13)	O23	C28	C14	118,0(6)
O13	Gd1	Gd2	159,39(11)	O16	C28	C14	118,7(6)
O12	Gd1	Gd2	68,72(10)	C62	C29	C67	117,9(6)
O8	Gd1	Gd2	112,08(11)	C62	C29	C34	122,0(6)
O5	Gd1	Gd2	37,35(10)	C67	C29	C34	120,1(6)
O10	Gd1	Gd2	84,69(10)	O24	C30	O13	123,8(5)
O6	Gd1	Gd2	34,35(9)	O24	C30	C26	118,1(5)
C35	Gd1	Gd2	60,26(12)	O13	C30	C26	118,1(5)
O16	Gd2	O19	101,53(19)	O11	C31	O4	118,8(6)
O16	Gd2	O17	155,38(16)	O11	C31	C41	121,3(6)
O19	Gd2	O17	87,83(18)	O4	C31	C41	119,9(6)
O16	Gd2	O6	77,44(15)	O11	C31	Gd2	54,1(3)
O19	Gd2	O6	81,05(15)	O4	C31	Gd2	65,6(3)
O17	Gd2	O6	81,68(15)	C41	C31	Gd2	169,0(4)
O16	Gd2	O11	121,79(16)	C64	C32	C67	120,6(9)
O19	Gd2	O11	85,50(16)	C53	C33	C50	119,9(7)
O17	Gd2	O11	81,28(16)	C53	C33	C35	120,5(6)
O6	Gd2	O11	158,63(15)	C50	C33	C35	119,6(6)
O16	Gd2	O9	88,56(18)	O19	C34	O15	123,3(6)
O19	Gd2	O9	160,54(16)	O19	C34	C29	119,2(6)
O17	Gd2	O9	89,71(17)	O15	C34	C29	117,5(6)
O6	Gd2	O9	117,68(14)	O10	C35	O6	118,0(5)
O11	Gd2	O9	75,04(15)	O10	C35	C33	121,9(5)
O16	Gd2	O5	79,33(15)	O6	C35	C33	120,1(5)
O19	Gd2	O5	145,84(15)	O10	C35	Gd1	57,6(3)
O17	Gd2	O5	80,28(14)	O6	C35	Gd1	60,9(3)
O6	Gd2	O5	65,67(13)	C33	C35	Gd1	172,0(4)
O11	Gd2	O5	123,52(14)	C26	C36	C65	119,7(7)
O9	Gd2	O5	52,06(13)	C18	C37	C81	120,7(10)
O16	Gd2	O4	73,48(15)	O20	C38	O7	123,0(6)
O19	Gd2	O4	80,81(15)	O20	C38	C22	118,1(6)

O17	Gd2	O4	130,89(15)	O7	C38	C22	119,0(6)
O6	Gd2	O4	141,61(13)	C54	C39	C42	119,6(6)
O11	Gd2	O4	50,45(14)	C54	C39	C40	121,2(6)
O9	Gd2	O4	86,28(14)	C42	C39	C40	119,2(6)
O5	Gd2	O4	130,48(12)	O9	C40	O5	119,0(5)
O16	Gd2	C40	83,33(17)	O9	C40	C39	121,7(6)
O19	Gd2	C40	170,33(17)	O5	C40	C39	119,3(6)
O17	Gd2	C40	84,51(16)	O9	C40	Gd2	56,5(3)
O6	Gd2	C40	91,98(16)	O5	C40	Gd2	62,5(3)
O11	Gd2	C40	99,13(17)	C39	C40	Gd2	178,0(4)
O9	Gd2	C40	25,72(15)	C73	C41	C57	120,5(7)
O5	Gd2	C40	26,34(15)	C73	C41	C31	120,9(7)
O4	Gd2	C40	108,70(15)	C57	C41	C31	118,7(7)
O16	Gd2	C31	97,53(17)	C39	C42	C70	118,7(8)
O19	Gd2	C31	85,15(16)	O12	C43	O17	123,9(5)
O17	Gd2	C31	105,99(17)	O12	C43	C44	118,1(5)
O6	Gd2	C31	163,97(15)	O17	C43	C44	117,9(5)
O11	Gd2	C31	24,75(16)	C55	C44	C81	117,4(6)
O9	Gd2	C31	76,98(15)	C55	C44	C43	121,9(6)
O5	Gd2	C31	128,88(14)	C81	C44	C43	120,7(6)
O4	Gd2	C31	25,96(15)	C78	C45	C27	119,5(8)
C40	Gd2	C31	102,63(17)	C75	C46	C58	120,5(8)
O16	Gd2	Gd1	89,73(11)	C26	C47	C52	119,9(7)
O19	Gd2	Gd1	112,09(12)	C49	C48	C22	120,2(8)
O17	Gd2	Gd1	65,66(11)	C72	C49	C48	119,9(9)
O6	Gd2	Gd1	36,37(9)	C33	C50	C59	119,3(8)
O11	Gd2	Gd1	140,97(11)	C27	C51	C66	120,7(8)
O9	Gd2	Gd1	84,27(10)	C71	C52	C47	121,0(7)
O5	Gd2	Gd1	34,10(8)	C33	C53	C60	119,9(7)
O4	Gd2	Gd1	160,93(9)	C39	C54	C56	121,0(8)
C40	Gd2	Gd1	59,21(12)	C44	C55	C77	121,6(8)
C31	Gd2	Gd1	159,66(12)	C82	C56	C54	119,2(9)
O21	Gd3	O15	87,47(19)	C84	C57	C41	120,1(10)
O21	Gd3	O23	87,25(18)	C14	C58	C46	120,3(7)
O15	Gd3	O23	97,1(2)	C63	C59	C50	120,1(8)
O21	Gd3	O24	86,48(18)	C63	C60	C53	120,3(8)
O15	Gd3	O24	170,34(19)	C22	C61	C79	119,8(8)
O23	Gd3	O24	90,1(2)	C29	C62	C74	121,0(8)
O21	Gd3	O20	105,27(18)	C60	C63	C59	120,3(8)
O15	Gd3	O20	85,5(2)	C74	C64	C32	120,1(8)
O23	Gd3	O20	167,34(19)	C71	C65	C36	120,9(7)
O24	Gd3	O20	88,8(2)	C80	C66	C51	119,8(8)
O21	Gd3	O4	161,21(17)	C32	C67	C29	120,7(8)
O15	Gd3	O4	83,70(18)	C14	C68	C76	119,7(7)
O23	Gd3	O4	77,47(17)	C83	C69	C73	119,3(11)
O24	Gd3	O4	104,21(16)	C82	C70	C42	120,1(9)
O20	Gd3	O4	90,58(17)	C52	C71	C65	119,9(7)
C31	O4	Gd3	136,1(4)	C79	C72	C49	120,5(9)
C31	O4	Gd2	88,5(4)	C41	C73	C69	119,5(10)
Gd3	O4	Gd2	119,35(18)	C64	C74	C62	119,7(9)
C40	O5	Gd1	150,6(4)	C46	C75	C76	119,4(8)
C40	O5	Gd2	91,2(3)	C75	C76	C68	120,4(8)
Gd1	O5	Gd2	108,55(14)	C18	C77	C55	120,9(8)
C35	O6	Gd2	152,4(4)	C80	C78	C45	121,0(9)

C35	O6	Gd1	92,5(3)	C72	C79	C61	120,8(9)
Gd2	O6	Gd1	109,28(15)	C66	C80	C78	120,1(8)
C38	O7	Gd1	149,9(4)	C44	C81	C37	120,2(9)
C25	O8	Gd1	129,4(4)	C56	C82	C70	121,3(9)
C40	O9	Gd2	97,8(4)	C84	C83	C69	121,7(10)
C35	O10	Gd1	96,7(4)	C83	C84	C57	118,9(12)

8.5.4 Holmiumbenzoat, $\text{Ho}(\text{OBz})_3$

Tabelle 115. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Ho}(\text{OBz})_3$.

Atom	x	y	z	Ueq
Ho2	0,85254(7)	0,17126(4)	1,27471(3)	0,0328(2)
Ho1	0,95844(7)	0,22718(4)	1,43289(3)	0,0323(2)
Ho1'	0,51973(7)	0,26303(4)	1,93707(3)	0,0348(2)
Ho3'	0,82048(7)	0,28609(4)	1,61462(3)	0,0340(2)
Ho3	0,65323(7)	0,21170(4)	1,11929(3)	0,0333(2)
Ho2'	0,61931(8)	0,32073(4)	1,78301(4)	0,0422(3)
O7	0,8166(9)	0,1645(5)	1,3829(4)	0,030(3)
O8	1,0438(9)	0,3130(6)	1,3838(5)	0,040(3)
O9	1,0224(9)	0,1358(6)	1,3037(5)	0,041(3)
O10	0,9288(9)	0,2535(6)	1,3287(4)	0,036(3)
O11	0,5598(12)	0,2355(6)	1,8346(5)	0,047(3)
O12	0,6537(10)	0,3279(6)	1,8931(5)	0,042(3)
O13	0,8597(11)	0,0898(6)	1,2115(5)	0,048(3)
O14	0,4395(13)	0,3501(7)	1,8064(5)	0,062(5)
O15	0,6988(12)	0,2269(7)	1,2807(4)	0,059(5)
O16	0,8056(9)	0,2800(5)	1,4519(5)	0,041(3)
O17	0,6164(11)	0,2968(6)	1,0812(5)	0,048(4)
O18	0,7114(11)	0,1402(6)	1,1845(5)	0,043(3)
O19	0,4681(9)	0,1788(6)	1,0952(5)	0,045(3)
O20	0,9496(10)	0,2201(6)	1,2030(5)	0,045(3)
O21	1,0676(10)	0,2741(6)	1,5040(5)	0,044(3)
O22	0,8534(11)	0,1976(6)	1,5790(5)	0,049(4)
O23	0,7167(11)	0,1598(6)	1,0412(4)	0,041(3)
O24	0,7109(14)	0,4034(7)	1,8363(6)	0,072(5)
O25	1,0931(9)	0,1705(6)	1,3923(4)	0,038(3)
C26	0,7652(16)	0,1144(11)	1,3762(8)	0,051(6)
O27	0,5220(11)	0,2705(6)	1,7083(5)	0,042(3)
O28	0,8383(11)	0,2465(6)	1,1274(5)	0,046(3)
O29	0,6399(11)	0,2559(7)	1,6334(6)	0,066(5)
C30	0,9379(18)	0,2455(8)	1,1522(8)	0,040(5)
O31	0,4116(10)	0,2139(6)	1,0060(5)	0,043(3)
O32	0,9454(11)	0,1572(6)	1,5025(5)	0,050(4)
O33	0,3791(10)	0,3135(7)	1,8948(5)	0,051(4)
C34	0,3931(14)	0,1866(7)	1,0543(8)	0,030(4)
O35	0,4395(10)	0,1772(6)	1,8838(5)	0,043(3)
O36	0,5862(11)	0,2453(6)	1,2042(4)	0,044(4)
O37	0,7479(10)	0,0924(6)	1,3252(4)	0,042(3)
O38	0,7529(13)	0,3273(7)	1,5322(5)	0,069(5)

O39	0,7903(9)	0,2793(6)	1,7837(5)	0,041(3)
O40	0,8865(10)	0,2565(6)	1,7020(5)	0,048(4)
O41	0,6714(11)	0,2141(6)	1,9639(5)	0,044(3)
O42	1,0042(11)	0,3091(7)	1,5887(6)	0,061(4)
C43	1,0419(15)	0,2752(8)	1,1251(7)	0,034(4)
C44	0,7052(13)	0,0228(12)	1,4283(8)	0,056(7)
H44	0,7242	0,0015	1,395	0,079(7)
C45	0,7147(17)	0,0856(10)	1,4273(7)	0,047(6)
C46	0,4984(15)	0,1880(8)	1,8362(7)	0,035(4)
C47	1,037(2)	0,2912(10)	1,0664(8)	0,056(6)
H47	0,9672	0,2824	1,0456	0,079(7)
C48	0,7112(14)	0,1675(9)	0,9875(8)	0,039(5)
C49	1,1008(18)	0,1414(9)	1,3443(7)	0,049(6)
C50	0,2681(14)	0,1628(8)	1,0653(7)	0,036(4)
C51	0,2295(16)	0,1461(8)	1,1203(8)	0,041(5)
H51	0,2825	0,1473	1,1519	0,079(7)
C52	0,7111(19)	0,3816(10)	1,8873(9)	0,053(6)
C53	0,7555(17)	0,1211(9)	0,9459(7)	0,045(6)
C54	0,5887(15)	0,1471(8)	1,7473(6)	0,034(4)
H54	0,6491	0,1767	1,7506	0,079(7)
C55	0,9921(16)	0,3483(8)	1,2895(7)	0,033(4)
C56	0,4055(15)	0,0995(8)	1,7820(8)	0,042(5)
H56	0,3469	0,0968	1,8103	0,079(7)
C57	0,9904(16)	0,3045(11)	1,3355(8)	0,052(7)
C58	0,4963(16)	0,1422(9)	1,7877(7)	0,043(5)
C59	0,3996(19)	0,0590(8)	1,7331(8)	0,052(6)
H59	0,3375	0,0305	1,7282	0,079(7)
C60	1,1453(16)	0,2907(10)	1,1562(10)	0,056(6)
H60	1,1511	0,2808	1,1957	0,079(7)
O61	0,7863(16)	0,3695(9)	1,6627(10)	0,143(10)
O62	0,6486(14)	0,3940(9)	1,7160(6)	0,095(7)
C63	1,0825(17)	0,3033(11)	1,5532(9)	0,056(6)
C64	1,2072(15)	0,3287(9)	1,5652(6)	0,036(5)
C65	0,7186(17)	0,4054(9)	1,6787(8)	0,041(5)
C66	1,2195(15)	0,1174(10)	1,3312(7)	0,047(6)
C67	0,7659(17)	0,3241(9)	1,4770(7)	0,045(5)
C69	0,4382(15)	0,2182(8)	1,6256(7)	0,036(4)
C70	0,6046(19)	0,0413(11)	1,1188(7)	0,058(7)
H70	0,5533	0,0696	1,1292	0,079(7)
C71	0,7201(18)	0,0441(8)	1,1407(7)	0,043(5)
C72	0,4464(19)	0,2072(9)	1,5668(7)	0,048(5)
H72	0,5132	0,2203	1,5462	0,079(7)
C73	0,7679(17)	0,0947(10)	1,1806(8)	0,048(5)
C74	0,7918(16)	-0,0003(9)	1,1229(7)	0,042(5)
H74	0,8697	0,0017	1,1363	0,079(7)
C75	0,6832(14)	0,1153(9)	1,4787(7)	0,041(5)
H75	0,6923	0,1562	1,4801	0,079(7)
C76	0,5376(15)	0,2511(9)	1,6586(7)	0,039(5)
C77	0,9758(13)	0,2411(8)	1,7954(6)	0,027(4)
C78	0,9355(15)	0,1071(8)	1,5942(7)	0,041(5)
C79	1,4349(17)	0,3746(8)	1,5917(7)	0,041(5)
H79	1,5113	0,3895	1,6009	0,079(7)
C80	1,3526(16)	0,3665(8)	1,6355(8)	0,044(5)
H80	1,374	0,3758	1,6743	0,079(7)

C81	0,9310(16)	0,1103(10)	1,6569(7)	0,048(6)
H81	0,9098	0,1447	1,6753	0,079(7)
C82	0,9702(17)	0,0545(8)	1,5688(8)	0,044(5)
H82	0,9752	0,0503	1,5281	0,079(7)
C83	0,0362(16)	0,1232(9)	1,0842(9)	0,046(5)
H83	-0,0416	0,1091	1,0898	0,079(7)
C84	0,0730(17)	0,1404(9)	1,0266(9)	0,054(6)
H84	0,0196	0,1381	0,9951	0,079(7)
C85	0,9095(16)	0,1563(8)	1,5562(7)	0,039(5)
C86	0,1097(17)	0,1270(9)	1,1292(9)	0,049(5)
H86	0,0835	0,1172	1,1667	0,079(7)
C87	0,7384(16)	0,3731(10)	1,3819(8)	0,048(5)
H87	0,7677	0,34	1,3648	0,079(7)
C88	0,9722(17)	0,2416(9)	1,8543(8)	0,049(5)
H88	0,9052	0,2543	1,8722	0,079(7)
C89	1,2437(18)	0,3456(9)	1,6228(8)	0,051(6)
H89	1,1892	0,3419	1,653	0,079(7)
C90	0,8809(16)	0,2603(8)	1,7574(7)	0,039(5)
C91	0,7261(16)	0,3736(9)	1,4401(7)	0,044(5)
C92	0,9004(16)	0,3463(9)	1,2467(7)	0,043(5)
H92	0,8408	0,3162	1,2477	0,079(7)
C93	0,898(2)	0,3883(11)	1,2035(7)	0,060(7)
H93	0,8364	0,3875	1,1761	0,079(7)
C94	0,491(2)	0,0646(9)	1,6936(9)	0,059(7)
H94	0,4873	0,0401	1,6606	0,079(7)
C95	0,957(2)	0,0647(10)	1,6889(8)	0,062(7)
H95	0,9471	0,0672	1,7294	0,079(7)
C96	0,3340(15)	0,2018(10)	1,6539(8)	0,055(6)
H96	0,3257	0,2095	1,6938	0,079(7)
C97	1,4042(18)	0,3609(10)	1,5352(10)	0,057(6)
H97	1,4586	0,3679	1,5054	0,079(7)
C98	0,7831(17)	0,0678(9)	0,9706(8)	0,050(6)
H98	0,7816	0,063	1,0113	0,079(7)
C99	0,1862(15)	0,1599(8)	1,0185(8)	0,039(4)
H99	0,2104	0,1717	0,9811	0,079(7)
O100	0,5288(11)	0,3386(6)	1,0045(5)	0,045(3)
C101	0,5541(14)	0,3943(8)	1,0942(7)	0,035(4)
C102	0,5769(16)	0,3952(10)	1,1531(8)	0,049(6)
H102	0,6059	0,3622	1,1705	0,079(7)
C103	0,5260(18)	0,4471(9)	1,0669(8)	0,051(6)
H103	0,5139	0,4482	1,0263	0,079(7)
C104	0,820(2)	0,0285(10)	0,8746(8)	0,067(7)
H104	0,8402	-0,0019	0,8499	0,079(7)
C105	0,814(2)	0,0196(10)	0,9327(9)	0,068(7)
H105	0,8303	-0,0167	0,9485	0,079(7)
C106	0,6386(16)	0,0849(13)	1,5278(7)	0,056(6)
H106	0,6108	0,1054	1,5598	0,079(7)
C107	0,2461(16)	0,3676(9)	1,8356(8)	0,047(5)
C108	0,796(2)	0,0827(12)	0,8503(8)	0,085(10)
H108	0,8044	0,0887	0,8101	0,079(7)
C109	0,5671(14)	0,3406(8)	1,0581(8)	0,036(4)
C110	0,5986(13)	0,2403(8)	1,2587(7)	0,035(4)
C111	0,3616(17)	0,3439(8)	1,8466(8)	0,044(5)
C112	0,7583(15)	0,1293(10)	0,8875(7)	0,048(6)

H112	0,7363	0,1644	0,8713	0,079(7)
C113	0,5248(14)	0,2573(8)	1,3591(7)	0,035(4)
H113	0,6006	0,2532	1,3737	0,079(7)
C114	0,7976(14)	0,3792(9)	1,9871(7)	0,041(5)
H114	0,7829	0,3385	1,9869	0,079(7)
C115	1,4211(17)	0,1036(10)	1,3582(10)	0,056(6)
H115	1,4822	0,1078	1,3859	0,079(7)
C116	0,3924(14)	0,2601(9)	1,2749(7)	0,042(5)
H116	0,3792	0,2597	1,2344	0,079(7)
C117	1,289(2)	0,3357(9)	1,5211(8)	0,053(6)
H117	1,2686	0,3243	1,4826	0,079(7)
C118	1,164(2)	0,2067(12)	1,8624(9)	0,072(8)
H118	1,227	0,196	1,8855	0,079(7)
C119	1,0634(17)	0,2239(10)	1,8899(8)	0,056(6)
H119	1,0572	0,2235	1,9308	0,079(7)
C120	1,1733(17)	0,2050(11)	1,8035(9)	0,067(8)
H120	1,2417	0,193	1,7864	0,079(7)
C121	0,5005(16)	0,2511(9)	1,2977(8)	0,044(5)
C122	1,0771(18)	0,2219(11)	1,7673(9)	0,065(7)
H122	1,0811	0,2203	1,7265	0,079(7)
C123	0,7665(16)	0,4122(9)	1,9375(8)	0,043(5)
C124	1,354(2)	0,0735(13)	1,2645(10)	0,088(10)
H124	1,3699	0,0586	1,2274	0,079(7)
C125	1,4402(15)	0,0799(9)	1,3047(10)	0,058(6)
H125	1,5147	0,068	1,2958	0,079(7)
C126	0,7774(17)	0,4722(9)	1,9376(9)	0,049(5)
H126	0,7536	0,4929	1,9048	0,079(7)
C127	1,2351(19)	0,0890(11)	1,2772(8)	0,071(8)
H127	1,1727	0,0805	1,2509	0,079(7)
C128	1,3070(16)	0,1221(9)	1,3724(8)	0,048(5)
H128	1,293	0,1373	1,4097	0,079(7)
C129	0,2985(15)	0,2704(10)	1,3148(8)	0,053(6)
H129	0,2235	0,2765	1,3002	0,079(7)
C130	0,8486(14)	0,4067(11)	2,0347(8)	0,055(7)
H130	0,8775	0,3851	2,0656	0,079(7)
C131	1,2326(18)	0,3346(9)	1,0705(11)	0,057(6)
H131	1,2965	0,3545	1,0525	0,079(7)
C132	0,4349(18)	0,2694(10)	1,3968(8)	0,061(7)
H132	0,4507	0,2764	1,4367	0,079(7)
C133	0,754(2)	-0,0465(10)	1,0870(9)	0,066(7)
H133	0,8023	-0,0764	1,0773	0,079(7)
C134	0,3194(19)	0,2711(12)	1,3742(9)	0,070(8)
H134	0,2566	0,2726	1,3999	0,079(7)
C135	0,857(2)	0,4697(12)	2,0368(10)	0,071(7)
H135	0,885	0,4894	2,0709	0,079(7)
C136	0,9970(19)	0,0146(10)	1,6671(9)	0,061(6)
H136	1,0232	-0,0146	1,6915	0,079(7)
C137	0,251(2)	0,1627(11)	1,5641(11)	0,070(7)
H137	0,1859	0,146	1,543	0,079(7)
C138	0,997(2)	0,0092(9)	1,6061(9)	0,061(6)
H138	1,0156	-0,0265	1,5896	0,079(7)
C139	0,569(3)	-0,0041(12)	1,0818(11)	0,087(8)
H139	0,4918	-0,006	1,0668	0,079(7)
C140	0,7113(19)	0,4177(10)	1,3455(9)	0,061(7)

H140	0,7176	0,4146	1,3048	0,079(7)
C141	0,1680(16)	0,3700(10)	1,8796(10)	0,056(6)
H141	0,1884	0,3573	1,917	0,079(7)
C142	0,0589(19)	0,3909(12)	1,8701(12)	0,083(9)
H142	0,0091	0,3938	1,9021	0,079(7)
C143	0,687(2)	0,4232(10)	1,4669(9)	0,073(8)
H143	0,6773	0,4253	1,5075	0,079(7)
C144	0,2446(19)	0,1743(11)	1,6222(9)	0,068(7)
H144	0,1752	0,1629	1,6415	0,079(7)
C145	0,636(2)	0,0256(15)	1,5282(10)	0,076(8)
H145	0,6133	0,0062	1,5625	0,079(7)
C146	0,559(3)	0,4438(10)	1,1880(9)	0,113(13)
H146	0,5619	0,442	1,2289	0,079(7)
C147	1,2428(17)	0,3214(12)	1,1289(11)	0,071(7)
H147	1,3115	0,3322	1,1501	0,079(7)
C148	0,640(3)	-0,0460(11)	1,0660(9)	0,104(12)
H148	0,6108	-0,0757	1,0401	0,079(7)
C149	0,534(3)	0,4961(12)	1,1586(9)	0,108(13)
H149	0,5307	0,5309	1,1801	0,079(7)
C150	0,353(3)	0,1759(11)	1,5382(9)	0,082(9)
H150	0,3625	0,1638	1,4994	0,079(7)
C151	0,824(2)	0,5021(11)	1,9867(10)	0,075(7)
H151	0,8336	0,543	1,987	0,079(7)
C152	0,020(2)	0,4076(11)	1,8164(14)	0,090(9)
H152	-0,0547	0,4207	1,8094	0,079(7)
C153	0,758(3)	0,4867(14)	1,6106(14)	0,158(16)
H153	0,817	0,4671	1,5923	0,079(7)
C154	0,517(2)	0,4961(11)	1,1003(10)	0,083(9)
H154	0,4976	0,5307	1,0822	0,079(7)
C155	0,990(3)	0,4324(11)	1,2013(10)	0,079(8)
H155	0,9895	0,4605	1,1718	0,079(7)
C156	1,085(3)	0,4354(11)	1,2430(12)	0,090(9)
H156	1,1463	0,4645	1,2412	0,079(7)
C157	0,673(2)	0,4690(10)	1,3732(10)	0,069(7)
H157	0,6556	0,5012	1,3507	0,079(7)
C158	0,666(2)	-0,0076(12)	1,4803(11)	0,076(7)
H158	0,6618	-0,0485	1,4817	0,079(7)
C159	0,662(3)	0,4710(11)	1,4299(10)	0,101(12)
H159	0,6376	0,5051	1,4472	0,079(7)
C160	1,082(2)	0,3938(11)	1,2858(10)	0,072(7)
H160	1,1426	0,3955	1,3139	0,079(7)
C161	0,5852(18)	0,1035(10)	1,6999(8)	0,052(6)
H161	0,6479	0,1025	1,6741	0,079(7)
C162	0,7236(19)	0,5413(9)	1,5887(8)	0,058(6)
H162	0,7435	0,5523	1,5506	0,079(7)
C163	0,702(2)	0,4637(10)	1,6593(12)	0,125(13)
C164	1,131(2)	0,3198(15)	1,0365(10)	0,108(12)
H164	1,1263	0,3284	0,9966	0,079(7)
C165	0,214(2)	0,3895(16)	1,7833(10)	0,121(15)
H165	0,2684	0,3952	1,7533	0,079(7)
C166	0,099(3)	0,4033(19)	1,7754(12)	0,17(2)
H166	0,0746	0,4103	1,737	0,079(7)
C167	0,629(3)	0,4996(13)	1,6945(16)	0,18(2)
H167	0,593	0,4841	1,728	0,079(7)

C168	0,613(3)	0,5584(13)	1,6777(16)	0,39(6)
H168	0,5726	0,5831	1,7018	0,079(7)
C169	0,660(6)	0,5789(18)	1,623(2)	0,33(4)
H169	0,6492	0,617	1,6108	0,079(7)

Tabelle 116. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Ho}(\text{OBz})_3$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Ho2	0,0318(4)	0,0429(6)	0,0244(4)	-0,0047(4)	-0,0023(3)	0,0101(4)
Ho1	0,0325(4)	0,0434(6)	0,0218(4)	-0,0037(4)	-0,0015(3)	0,0099(4)
Ho1'	0,0375(5)	0,0361(6)	0,0314(4)	-0,0112(4)	-0,0041(4)	0,0090(4)
Ho3'	0,0378(5)	0,0399(6)	0,0250(4)	-0,0082(4)	0,0014(3)	0,0090(4)
Ho3	0,0361(5)	0,0385(6)	0,0257(4)	-0,0067(4)	-0,0059(3)	0,0070(4)
Ho2'	0,0443(5)	0,0393(6)	0,0439(5)	-0,0152(4)	-0,0110(4)	0,0132(5)
O7	0,025(6)	0,028(7)	0,035(6)	-0,012(6)	-0,012(5)	-0,007(5)
O8	0,033(6)	0,054(9)	0,032(6)	-0,002(6)	-0,001(5)	0,006(6)
O9	0,026(6)	0,060(10)	0,038(6)	-0,006(6)	-0,015(5)	0,022(6)
O10	0,015(5)	0,080(11)	0,014(5)	-0,011(6)	-0,003(4)	0,006(6)
O11	0,073(9)	0,027(8)	0,040(7)	-0,014(6)	-0,010(6)	0,001(7)
O12	0,046(8)	0,035(9)	0,046(7)	-0,014(6)	-0,007(6)	0,011(7)
O13	0,041(7)	0,053(10)	0,048(7)	-0,006(7)	-0,012(6)	-0,003(7)
O14	0,078(10)	0,070(11)	0,042(7)	-0,025(7)	-0,009(7)	0,034(9)
O15	0,068(9)	0,093(12)	0,020(6)	-0,024(7)	-0,024(6)	0,040(9)
O16	0,023(6)	0,033(8)	0,069(8)	-0,007(6)	0,017(6)	0,015(6)
O17	0,066(9)	0,043(9)	0,037(7)	-0,013(6)	-0,009(6)	0,022(8)
O18	0,050(8)	0,038(8)	0,043(7)	-0,004(6)	0,017(6)	0,005(7)
O19	0,019(6)	0,064(10)	0,049(7)	0,002(7)	-0,018(5)	-0,023(6)
O20	0,046(7)	0,052(9)	0,035(7)	-0,014(6)	-0,006(6)	-0,002(7)
O21	0,043(7)	0,045(9)	0,040(7)	0,008(6)	-0,022(6)	-0,010(6)
O22	0,070(9)	0,044(9)	0,036(6)	-0,011(6)	-0,007(6)	0,034(8)
O23	0,063(8)	0,048(9)	0,014(5)	-0,016(5)	-0,007(5)	0,016(7)
O24	0,100(12)	0,049(11)	0,066(10)	-0,021(8)	-0,050(9)	0,012(9)
O25	0,025(6)	0,068(10)	0,024(5)	-0,005(6)	0,000(5)	0,029(7)
C26	0,042(11)	0,079(18)	0,034(10)	-0,028(11)	-0,015(9)	0,026(12)
O27	0,059(8)	0,038(8)	0,029(6)	-0,002(6)	-0,014(6)	0,010(7)
O28	0,044(7)	0,044(9)	0,050(8)	-0,001(6)	0,000(6)	-0,010(7)
O29	0,039(8)	0,089(13)	0,073(9)	0,007(9)	0,023(7)	0,020(8)
C30	0,060(13)	0,018(10)	0,040(10)	-0,012(8)	-0,006(10)	-0,017(9)
O31	0,034(7)	0,051(9)	0,044(7)	-0,004(6)	0,013(6)	-0,007(6)
O32	0,068(9)	0,033(8)	0,050(8)	-0,018(6)	-0,021(7)	0,021(7)
O33	0,038(7)	0,080(12)	0,037(7)	-0,009(7)	-0,003(6)	0,017(8)
C34	0,029(9)	0,017(10)	0,045(10)	-0,002(8)	0,004(8)	-0,005(8)
O35	0,050(8)	0,046(9)	0,034(6)	-0,017(6)	-0,010(6)	0,009(7)
O36	0,059(8)	0,055(10)	0,020(6)	-0,005(6)	0,005(5)	0,019(7)
O37	0,057(8)	0,050(9)	0,017(5)	-0,018(5)	-0,005(5)	-0,010(7)
O38	0,100(12)	0,079(12)	0,037(7)	0,015(7)	0,017(7)	0,068(11)
O39	0,020(6)	0,063(10)	0,044(7)	-0,002(6)	0,003(5)	0,024(6)
O40	0,044(7)	0,068(11)	0,036(7)	-0,006(7)	-0,006(6)	0,034(8)
O41	0,068(9)	0,029(8)	0,036(6)	-0,006(6)	-0,007(6)	0,015(7)
O42	0,052(8)	0,073(12)	0,058(8)	-0,002(8)	0,035(7)	0,003(8)
C43	0,042(10)	0,036(12)	0,025(8)	-0,007(8)	-0,015(7)	0,008(9)

C44	0,011(8)	0,12(2)	0,032(10)	-0,029(12)	0,006(7)	0,000(11)
C45	0,058(13)	0,065(16)	0,021(9)	-0,012(9)	-0,003(8)	0,026(12)
C46	0,041(10)	0,029(11)	0,034(9)	-0,008(8)	-0,014(8)	0,004(9)
C47	0,077(15)	0,049(15)	0,039(11)	0,011(10)	-0,015(11)	-0,006(13)
C48	0,024(9)	0,046(13)	0,048(11)	-0,009(9)	0,015(8)	0,015(9)
C49	0,075(14)	0,044(13)	0,031(9)	0,014(9)	0,030(10)	0,027(12)
C50	0,029(9)	0,038(12)	0,041(10)	-0,013(9)	-0,002(8)	0,006(9)
C51	0,046(11)	0,032(12)	0,045(10)	-0,015(9)	-0,002(9)	0,009(9)
C52	0,058(13)	0,045(15)	0,058(13)	-0,007(12)	-0,007(11)	0,023(12)
C53	0,061(12)	0,058(15)	0,021(8)	-0,007(9)	0,000(8)	0,036(12)
C54	0,049(11)	0,031(11)	0,023(8)	0,000(7)	-0,001(8)	0,005(9)
C55	0,052(11)	0,014(9)	0,032(9)	0,006(7)	-0,005(8)	-0,006(9)
C56	0,030(9)	0,043(13)	0,048(10)	-0,018(9)	0,007(8)	-0,020(9)
C57	0,033(10)	0,081(18)	0,044(11)	-0,039(12)	-0,017(9)	0,029(12)
C58	0,050(11)	0,041(13)	0,037(9)	-0,019(9)	0,003(9)	-0,010(10)
C59	0,078(15)	0,022(11)	0,054(12)	-0,014(9)	0,016(11)	-0,018(10)
C60	0,032(10)	0,062(16)	0,073(14)	-0,015(12)	-0,026(10)	0,000(11)
O61	0,080(12)	0,126(18)	0,23(2)	-0,137(18)	-0,039(14)	0,056(13)
O62	0,089(12)	0,15(2)	0,035(8)	-0,017(9)	0,036(8)	-0,044(12)
C63	0,043(12)	0,078(18)	0,050(12)	0,016(12)	-0,017(10)	0,029(12)
C64	0,043(10)	0,052(13)	0,013(7)	0,001(8)	-0,001(7)	0,006(10)
C65	0,048(11)	0,027(11)	0,047(11)	-0,029(9)	-0,018(9)	0,005(9)
C66	0,040(10)	0,078(17)	0,027(8)	-0,007(9)	-0,009(8)	0,034(11)
C67	0,056(12)	0,054(14)	0,028(9)	0,020(9)	0,004(8)	0,024(11)
C69	0,038(10)	0,027(11)	0,043(10)	0,005(8)	0,003(8)	-0,002(9)
C70	0,075(15)	0,074(18)	0,030(10)	-0,005(10)	-0,010(10)	0,036(14)
C71	0,068(13)	0,030(12)	0,029(9)	0,004(8)	0,005(9)	-0,001(10)
C72	0,076(14)	0,047(14)	0,019(8)	-0,009(9)	-0,001(9)	-0,013(11)
C73	0,044(11)	0,054(15)	0,048(11)	-0,004(10)	0,013(9)	0,010(11)
C74	0,048(11)	0,041(13)	0,034(9)	0,005(9)	-0,002(8)	-0,016(10)
C75	0,035(10)	0,058(14)	0,028(9)	0,002(9)	0,001(7)	-0,003(10)
C76	0,036(10)	0,044(13)	0,036(10)	0,010(9)	0,001(8)	0,006(10)
C77	0,022(8)	0,035(11)	0,024(8)	0,002(7)	0,004(6)	0,000(8)
C78	0,047(11)	0,042(12)	0,036(9)	-0,014(9)	-0,024(8)	0,024(10)
C79	0,050(11)	0,038(13)	0,034(9)	-0,008(9)	-0,010(9)	0,006(10)
C80	0,052(12)	0,030(12)	0,047(11)	-0,014(9)	-0,029(10)	-0,003(10)
C81	0,057(12)	0,066(16)	0,024(8)	0,005(9)	0,015(8)	0,030(12)
C82	0,062(13)	0,029(12)	0,040(10)	-0,005(9)	0,011(9)	0,006(10)
C83	0,030(10)	0,047(14)	0,060(13)	0,001(11)	0,014(9)	-0,007(10)
C84	0,045(12)	0,042(14)	0,072(14)	-0,011(11)	-0,039(11)	-0,003(10)
C85	0,054(12)	0,027(11)	0,034(9)	-0,008(8)	0,001(9)	-0,015(9)
C86	0,046(12)	0,051(15)	0,049(12)	0,023(10)	0,007(10)	-0,009(11)
C87	0,050(12)	0,057(15)	0,040(10)	0,006(10)	-0,010(9)	0,020(11)
C88	0,052(12)	0,049(14)	0,044(11)	0,009(10)	-0,010(9)	0,004(11)
C89	0,063(13)	0,051(14)	0,040(10)	-0,011(10)	-0,024(10)	0,008(11)
C90	0,057(11)	0,036(12)	0,026(8)	-0,016(8)	-0,012(8)	0,017(10)
C91	0,051(11)	0,050(14)	0,034(9)	0,009(9)	0,015(8)	0,034(11)
C92	0,042(10)	0,054(14)	0,037(10)	0,009(9)	0,001(8)	0,031(11)
C93	0,092(17)	0,073(18)	0,019(8)	-0,015(10)	-0,021(10)	0,030(15)
C94	0,085(16)	0,042(14)	0,051(12)	-0,037(11)	-0,017(12)	0,019(13)
C95	0,092(17)	0,058(16)	0,038(11)	0,006(11)	0,025(11)	0,018(14)
C96	0,025(10)	0,090(19)	0,051(11)	-0,027(12)	0,004(8)	0,006(11)
C97	0,046(12)	0,054(16)	0,071(14)	0,006(12)	0,016(11)	-0,003(12)
C98	0,066(13)	0,042(13)	0,044(10)	-0,009(10)	-0,006(10)	0,020(12)

C99	0,035(10)	0,040(12)	0,042(10)	-0,001(9)	0,000(8)	-0,005(9)
O100	0,073(9)	0,035(8)	0,025(6)	-0,010(6)	-0,005(6)	0,000(7)
C101	0,036(9)	0,037(12)	0,033(9)	-0,008(8)	0,003(7)	0,003(9)
C102	0,044(11)	0,057(15)	0,048(11)	-0,010(10)	0,017(9)	0,008(11)
C103	0,080(15)	0,040(13)	0,036(10)	-0,010(9)	-0,007(10)	0,027(12)
C104	0,105(18)	0,056(16)	0,042(11)	-0,003(11)	-0,030(12)	0,033(15)
C105	0,111(19)	0,038(14)	0,055(13)	-0,013(11)	-0,016(13)	0,021(14)
C106	0,038(11)	0,10(2)	0,023(9)	0,011(11)	-0,008(8)	-0,002(13)
C107	0,042(11)	0,059(15)	0,041(10)	-0,024(10)	0,005(8)	0,016(10)
C108	0,14(2)	0,10(2)	0,026(10)	0,001(12)	0,014(13)	0,05(2)
C109	0,025(9)	0,037(12)	0,045(10)	-0,012(9)	0,007(8)	-0,004(8)
C110	0,020(8)	0,048(13)	0,037(9)	-0,008(9)	-0,005(7)	0,005(8)
C111	0,054(12)	0,032(12)	0,048(11)	-0,016(9)	-0,011(9)	0,026(10)
C112	0,038(10)	0,068(16)	0,040(10)	-0,012(10)	-0,005(8)	0,019(11)
C113	0,027(9)	0,041(12)	0,038(9)	0,000(8)	0,005(7)	0,002(9)
C114	0,028(9)	0,051(13)	0,040(10)	-0,014(9)	0,002(8)	-0,018(9)
C115	0,038(11)	0,047(15)	0,082(15)	-0,007(12)	-0,026(11)	-0,001(10)
C116	0,029(9)	0,055(14)	0,041(10)	-0,002(9)	-0,016(8)	-0,002(9)
C117	0,089(16)	0,041(13)	0,030(9)	-0,002(9)	0,007(10)	0,001(13)
C118	0,073(15)	0,10(2)	0,045(12)	0,017(13)	-0,025(11)	0,044(16)
C119	0,052(12)	0,075(18)	0,043(11)	0,005(11)	-0,011(9)	0,023(13)
C120	0,037(11)	0,11(2)	0,061(13)	0,023(13)	0,007(10)	0,042(14)
C121	0,049(11)	0,035(12)	0,049(11)	0,001(9)	-0,005(9)	0,022(10)
C122	0,055(13)	0,10(2)	0,047(12)	0,023(12)	0,020(10)	0,028(14)
C123	0,049(11)	0,027(12)	0,051(11)	-0,002(9)	-0,018(9)	0,000(10)
C124	0,073(17)	0,12(3)	0,075(16)	-0,008(16)	0,027(14)	0,061(19)
C125	0,021(9)	0,047(14)	0,104(17)	-0,028(13)	-0,015(10)	0,009(9)
C126	0,046(11)	0,032(12)	0,070(13)	-0,003(11)	0,004(10)	-0,007(10)
C127	0,067(14)	0,12(2)	0,032(10)	-0,022(12)	-0,017(10)	0,044(16)
C128	0,041(11)	0,063(16)	0,041(10)	-0,004(10)	-0,001(8)	0,017(11)
C129	0,021(9)	0,082(18)	0,054(12)	-0,021(11)	0,009(8)	-0,001(10)
C130	0,020(9)	0,10(2)	0,044(11)	-0,031(12)	0,000(8)	0,006(11)
C131	0,045(12)	0,021(12)	0,106(19)	0,010(12)	0,001(13)	-0,001(10)
C132	0,067(14)	0,082(18)	0,032(10)	-0,035(11)	0,008(10)	-0,008(13)
C133	0,11(2)	0,028(13)	0,049(13)	-0,011(11)	-0,004(14)	-0,032(13)
C134	0,054(14)	0,11(2)	0,049(12)	-0,030(13)	0,014(11)	0,016(15)
C135	0,074(15)	0,077(19)	0,059(14)	-0,042(14)	0,001(12)	-0,017(14)
C136	0,075(15)	0,049(15)	0,060(13)	0,019(11)	0,003(12)	0,019(13)
C137	0,062(15)	0,059(17)	0,088(17)	-0,015(14)	-0,033(13)	0,012(13)
C138	0,107(18)	0,016(11)	0,060(13)	0,002(10)	-0,015(13)	0,005(12)
C139	0,11(2)	0,062(19)	0,086(18)	-0,022(16)	-0,025(16)	0,004(17)
C140	0,083(16)	0,058(16)	0,046(11)	0,004(11)	0,020(11)	0,026(14)
C141	0,034(11)	0,057(16)	0,080(15)	0,041(12)	0,019(10)	0,007(11)
C142	0,048(13)	0,09(2)	0,12(2)	0,051(18)	0,008(14)	0,030(15)
C143	0,12(2)	0,046(15)	0,055(13)	0,002(11)	0,016(13)	0,045(16)
C144	0,054(13)	0,09(2)	0,051(12)	-0,031(13)	-0,017(10)	-0,020(13)
C145	0,070(16)	0,10(3)	0,052(14)	0,003(15)	-0,006(12)	0,001(17)
C146	0,24(3)	0,060(17)	0,042(12)	-0,053(12)	-0,082(17)	0,08(2)
C147	0,027(11)	0,11(2)	0,077(16)	-0,003(15)	-0,007(11)	-0,019(13)
C148	0,24(4)	0,037(16)	0,037(12)	-0,013(11)	-0,017(18)	0,02(2)
C149	0,18(3)	0,09(2)	0,056(14)	-0,035(14)	-0,060(16)	0,10(2)
C150	0,15(3)	0,055(17)	0,032(11)	-0,024(11)	0,024(14)	-0,032(17)
C151	0,101(19)	0,045(16)	0,079(16)	-0,024(13)	-0,022(15)	0,005(14)
C152	0,078(18)	0,045(17)	0,15(3)	-0,021(17)	-0,035(18)	0,029(15)

C154	0,12(2)	0,054(17)	0,077(16)	-0,026(13)	-0,046(15)	0,036(17)
C155	0,14(3)	0,039(16)	0,057(14)	0,002(12)	-0,039(16)	0,017(18)
C156	0,14(3)	0,027(15)	0,098(19)	0,021(14)	-0,022(19)	-0,004(16)
C157	0,101(19)	0,044(15)	0,063(14)	0,023(12)	-0,023(13)	0,013(14)
C158	0,077(17)	0,056(18)	0,093(19)	-0,002(15)	0,007(15)	-0,012(14)
C159	0,19(3)	0,064(19)	0,060(15)	0,007(13)	-0,019(17)	0,09(2)
C160	0,087(17)	0,057(17)	0,066(15)	-0,007(13)	-0,016(13)	-0,026(14)
C161	0,051(12)	0,069(17)	0,038(10)	-0,010(10)	0,006(9)	0,026(13)
C162	0,080(15)	0,036(13)	0,054(12)	-0,017(10)	0,003(11)	-0,026(12)
C163	0,11(2)	0,12(3)	0,13(3)	-0,07(2)	-0,01(2)	-0,10(2)
C164	0,09(2)	0,18(4)	0,045(14)	0,053(18)	0,038(15)	-0,02(2)
C165	0,084(19)	0,24(4)	0,052(14)	-0,010(19)	-0,014(13)	0,10(2)
C166	0,16(3)	0,33(6)	0,052(16)	0,00(2)	-0,014(18)	0,18(4)
C167	0,14(3)	0,13(4)	0,26(5)	-0,09(3)	0,11(3)	-0,01(3)
C168	0,08(3)	0,08(3)	1,01(19)	-0,19(7)	-0,18(6)	0,04(3)

Tabelle 117. Atomabstände/Å von Ho(OBz)₃.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Ho2	O15	2,230(11)	C56	C59	1,43(2)
Ho2	O9	2,235(9)	C59	C94	1,38(3)
Ho2	O20	2,239(13)	C60	C147	1,42(3)
Ho2	O10	2,338(13)	O61	C65	1,216(19)
Ho2	O13	2,340(13)	O62	C65	1,19(2)
Ho2	O37	2,393(13)	C63	C64	1,51(3)
Ho2	O7	2,499(10)	C64	C117	1,37(2)
Ho2	O18	2,645(13)	C64	C89	1,41(2)
Ho2	C26	2,81(2)	C65	C163	1,42(3)
Ho2	C73	2,86(2)	C66	C128	1,35(2)
Ho2	Ho1	3,9433(11)	C66	C127	1,40(2)
Ho1	O16	2,223(9)	C67	C91	1,50(2)
Ho1	O21	2,241(12)	C69	C72	1,36(2)
Ho1	O32	2,252(14)	C69	C96	1,38(2)
Ho1	O25	2,266(9)	C69	C76	1,50(3)
Ho1	O7	2,352(11)	C70	C139	1,36(3)
Ho1	O8	2,409(13)	C70	C71	1,39(3)
Ho1	O10	2,469(10)	C71	C74	1,40(2)
Ho1	C57	2,85(2)	C71	C73	1,52(3)
Ho1'	O41	2,196(12)	C72	C150	1,39(3)
Ho1'	O33	2,241(12)	C74	C133	1,37(3)
Ho1'	O31	2,258(13)	C75	C106	1,40(3)
Ho1'	O100	2,288(11)	C77	C88	1,34(2)
Ho1'	O12	2,292(15)	C77	C122	1,42(2)
Ho1'	O35	2,409(12)	C77	C90	1,46(2)
Ho1'	O11	2,460(11)	C78	C82	1,41(2)
Ho1'	C46	2,842(16)	C78	C81	1,43(2)
Ho1'	Ho2'	3,9002(13)	C78	C85	1,46(2)
Ho3'	O29	2,168(14)	C79	C97	1,35(3)
Ho3'	O42	2,206(13)	C79	C80	1,38(2)
Ho3'	O22	2,220(11)	C80	C89	1,32(3)
Ho3'	O40	2,235(11)	C81	C95	1,32(3)

Ho3'	O61	2,241(15)	C82	C138	1,39(2)
Ho3'	O38	2,248(12)	C83	C86	1,31(3)
Ho3	O17	2,191(13)	C83	C84	1,43(3)
Ho3	O28	2,201(13)	C84	C99	1,35(3)
Ho3	O36	2,230(10)	C87	C91	1,33(2)
Ho3	O19	2,243(11)	C87	C140	1,36(3)
Ho3	O23	2,274(9)	C88	C119	1,39(2)
Ho3	O18	2,331(12)	C91	C143	1,38(2)
Ho2'	O39	2,215(9)	C92	C93	1,38(3)
Ho2'	O14	2,260(13)	C93	C155	1,40(3)
Ho2'	O27	2,268(12)	C94	C161	1,35(3)
Ho2'	O62	2,278(18)	C95	C136	1,35(3)
Ho2'	O11	2,340(14)	C96	C144	1,35(3)
Ho2'	O24	2,398(14)	C97	C117	1,43(3)
Ho2'	O12	2,526(11)	C98	C105	1,45(2)
Ho2'	C52	2,88(2)	O100	C109	1,286(19)
O7	C26	1,25(3)	O100	Ho1'	2,288(11)
O8	C57	1,251(19)	C101	C102	1,36(2)
O9	C49	1,27(2)	C101	C103	1,41(2)
O10	C57	1,32(3)	C101	C109	1,48(2)
O11	C46	1,25(2)	C102	C146	1,38(2)
O12	C52	1,35(3)	C103	C154	1,35(3)
O13	C73	1,26(2)	C104	C105	1,34(3)
O14	C111	1,28(2)	C104	C108	1,40(3)
O15	C110	1,293(17)	C106	C145	1,35(3)
O16	C67	1,26(2)	C107	C165	1,35(3)
O17	C109	1,29(2)	C107	C141	1,35(2)
O18	C73	1,26(2)	C107	C111	1,47(2)
O19	C34	1,273(18)	C108	C112	1,44(3)
O20	C30	1,30(2)	C110	C121	1,47(2)
O21	C63	1,30(2)	C113	C132	1,38(2)
O22	C85	1,280(19)	C113	C121	1,42(2)
O23	C48	1,233(19)	C114	C130	1,35(2)
O24	C52	1,26(2)	C114	C123	1,41(2)
O25	C49	1,278(19)	C115	C125	1,35(3)
C26	O37	1,264(18)	C115	C128	1,43(2)
C26	C45	1,44(3)	C116	C121	1,35(2)
O27	C76	1,228(19)	C116	C129	1,44(2)
O28	C30	1,26(2)	C118	C120	1,34(3)
O29	C76	1,301(19)	C118	C119	1,39(3)
C30	C43	1,47(3)	C120	C122	1,43(2)
O31	C34	1,279(19)	C123	C126	1,36(3)
O31	Ho1'	2,258(12)	C124	C125	1,33(3)
O32	C85	1,291(19)	C124	C127	1,45(3)
O33	C111	1,32(2)	C126	C151	1,38(3)
C34	C50	1,51(2)	C129	C134	1,36(3)
O35	C46	1,29(2)	C130	C135	1,43(3)
O36	C110	1,250(18)	C131	C147	1,37(3)
O38	C67	1,266(18)	C131	C164	1,40(3)
O39	C90	1,295(17)	C132	C134	1,41(3)
O40	C90	1,262(17)	C133	C148	1,38(4)
O41	C48	1,30(2)	C135	C151	1,42(3)
O42	C63	1,22(2)	C136	C138	1,39(3)
C43	C47	1,38(2)	C137	C150	1,33(3)

C43	C60	1,39(2)	C137	C144	1,34(3)
C44	C45	1,43(3)	C139	C148	1,34(3)
C44	C158	1,43(3)	C140	C157	1,42(3)
C45	C75	1,41(2)	C141	C142	1,37(2)
C46	C58	1,51(2)	C142	C152	1,36(3)
C47	C164	1,40(3)	C143	C159	1,42(3)
C48	O41	1,30(2)	C145	C158	1,38(3)
C48	C53	1,53(2)	C146	C149	1,41(3)
C49	C66	1,52(2)	C149	C154	1,34(3)
C50	C51	1,38(2)	C152	C166	1,31(3)
C50	C99	1,40(2)	C153	C163	1,372(18)
C51	C86	1,42(3)	C153	C162	1,421(17)
C52	C123	1,44(3)	C155	C156	1,42(3)
C53	C112	1,34(2)	C156	C160	1,36(3)
C53	C98	1,40(3)	C157	C159	1,29(3)
C54	C58	1,40(2)	C162	C169	1,396(18)
C54	C161	1,46(2)	C163	C167	1,447(17)
C55	C160	1,41(3)	C165	C166	1,38(3)
C55	C92	1,41(2)	C167	C168	1,420(18)
C55	C57	1,45(3)	C168	C169	1,423(19)
C56	C58	1,37(3)			

Tabelle 118. Winkel/° von Ho(OBz)₃.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O15	Ho2	O9	156,1(4)	O37	C26	Ho2	57,9(11)
O15	Ho2	O20	98,4(5)	C45	C26	Ho2	177,3(12)
O9	Ho2	O20	89,0(4)	C76	O27	Ho2'	141,3(13)
O15	Ho2	O10	76,9(4)	C30	O28	Ho3	149,4(13)
O9	Ho2	O10	82,0(4)	C76	O29	Ho3'	160,6(14)
O20	Ho2	O10	80,6(4)	O28	C30	O20	120,9(18)
O15	Ho2	O13	124,1(4)	O28	C30	C43	119,9(17)
O9	Ho2	O13	79,0(4)	O20	C30	C43	119,2(17)
O20	Ho2	O13	84,5(5)	C34	O31	Ho1'	156,2(11)
O10	Ho2	O13	156,0(4)	C85	O32	Ho1	133,6(11)
O15	Ho2	O37	91,4(5)	C111	O33	Ho1'	139,4(11)
O9	Ho2	O37	89,2(4)	O19	C34	O31	127,0(16)
O20	Ho2	O37	159,7(4)	O19	C34	C50	116,2(15)
O10	Ho2	O37	119,1(4)	O31	C34	C50	116,8(15)
O13	Ho2	O37	75,3(4)	C46	O35	Ho1'	95,5(11)
O15	Ho2	O7	80,7(4)	C110	O36	Ho3	141,5(10)
O9	Ho2	O7	80,6(4)	C26	O37	Ho2	95,5(14)
O20	Ho2	O7	146,1(4)	C67	O38	Ho3'	139,0(10)
O10	Ho2	O7	66,1(4)	C90	O39	Ho2'	151,8(10)
O13	Ho2	O7	124,2(4)	C90	O40	Ho3'	147,3(10)
O37	Ho2	O7	53,0(4)	C48	O41	Ho1'	148,9(12)
O15	Ho2	O18	73,7(4)	C63	O42	Ho3'	147,9(15)
O9	Ho2	O18	130,1(4)	C47	C43	C60	117(2)
O20	Ho2	O18	80,7(4)	C47	C43	C30	119,8(17)
O10	Ho2	O18	142,1(4)	C60	C43	C30	122,9(17)
O13	Ho2	O18	51,6(4)	C45	C44	C158	120,3(18)

O37	Ho2	O18	85,1(4)	C75	C45	C44	117,2(18)
O7	Ho2	O18	130,0(4)	C75	C45	C26	124(2)
O15	Ho2	C26	86,6(5)	C44	C45	C26	118,4(15)
O9	Ho2	C26	83,3(5)	O11	C46	O35	117,0(15)
O20	Ho2	C26	170,4(5)	O11	C46	C58	123,3(17)
O10	Ho2	C26	92,6(5)	O35	C46	C58	119,6(18)
O13	Ho2	C26	99,6(5)	O11	C46	Ho1'	59,7(9)
O37	Ho2	C26	26,6(5)	O35	C46	Ho1'	57,5(8)
O7	Ho2	C26	26,4(4)	C58	C46	Ho1'	172,0(12)
O18	Ho2	C26	108,7(5)	C43	C47	C164	124(2)
O15	Ho2	C73	98,7(5)	O23	C48	O41	123,3(14)
O9	Ho2	C73	104,7(5)	O23	C48	C53	119,3(16)
O20	Ho2	C73	83,9(5)	O41	C48	C53	117,4(15)
O10	Ho2	C73	163,0(5)	O9	C49	O25	125,9(15)
O13	Ho2	C73	25,7(4)	O9	C49	C66	116,7(14)
O37	Ho2	C73	77,1(5)	O25	C49	C66	117,0(18)
O7	Ho2	C73	129,9(5)	C51	C50	C99	118,2(16)
O18	Ho2	C73	26,1(4)	C51	C50	C34	122,7(16)
C26	Ho2	C73	103,6(6)	C99	C50	C34	119,1(16)
O15	Ho2	Ho1	89,4(3)	C50	C51	C86	120,7(17)
O9	Ho2	Ho1	66,8(3)	O24	C52	O12	116(2)
O20	Ho2	Ho1	112,1(3)	O24	C52	C123	123(2)
O10	Ho2	Ho1	36,0(3)	O12	C52	C123	121,0(19)
O13	Ho2	Ho1	141,0(3)	O24	C52	Ho2'	55,4(11)
O37	Ho2	Ho1	85,6(2)	O12	C52	Ho2'	61,3(10)
O7	Ho2	Ho1	34,4(3)	C123	C52	Ho2'	175,4(15)
O18	Ho2	Ho1	160,4(2)	C112	C53	C98	121,3(16)
C26	Ho2	Ho1	59,4(4)	C112	C53	C48	121,4(17)
C73	Ho2	Ho1	160,9(4)	C98	C53	C48	117,1(15)
O16	Ho1	O21	91,6(4)	C58	C54	C161	116,5(18)
O16	Ho1	O32	103,0(4)	C160	C55	C92	117,8(18)
O21	Ho1	O32	81,0(5)	C160	C55	C57	122,4(18)
O16	Ho1	O25	166,4(4)	C92	C55	C57	119,7(18)
O21	Ho1	O25	100,9(4)	C58	C56	C59	120,9(16)
O32	Ho1	O25	84,4(4)	O8	C57	O10	116(2)
O16	Ho1	O7	83,9(4)	O8	C57	C55	123(2)
O21	Ho1	O7	162,7(4)	O10	C57	C55	120,7(15)
O32	Ho1	O7	83,8(4)	O8	C57	Ho1	57,0(12)
O25	Ho1	O7	85,6(4)	O10	C57	Ho1	60,0(10)
O16	Ho1	O8	86,7(4)	C55	C57	Ho1	171,5(11)
O21	Ho1	O8	76,8(4)	C56	C58	C54	121,9(15)
O32	Ho1	O8	156,0(4)	C56	C58	C46	121,4(16)
O25	Ho1	O8	91,0(4)	C54	C58	C46	116,6(18)
O7	Ho1	O8	119,4(4)	C94	C59	C56	116,4(19)
O16	Ho1	O10	86,3(4)	C43	C60	C147	121(2)
O21	Ho1	O10	130,0(5)	C65	O61	Ho3'	150,3(15)
O32	Ho1	O10	147,9(5)	C65	O62	Ho2'	135,4(17)
O25	Ho1	O10	81,6(3)	O42	C63	O21	124(2)
O7	Ho1	O10	66,4(4)	O42	C63	C64	121,4(19)
O8	Ho1	O10	53,3(4)	O21	C63	C64	114,9(16)
O16	Ho1	C57	83,9(4)	C117	C64	C89	117,8(19)
O21	Ho1	C57	102,5(5)	C117	C64	C63	121,9(16)
O32	Ho1	C57	172,3(4)	C89	C64	C63	120,3(16)
O25	Ho1	C57	88,2(4)	O62	C65	O61	121(3)

O7	Ho1	C57	93,6(5)	O62	C65	C163	107,8(19)
O8	Ho1	C57	25,8(5)	O61	C65	C163	131(2)
O10	Ho1	C57	27,6(4)	C128	C66	C127	121,0(15)
O16	Ho1	Ho2	97,1(3)	C128	C66	C49	119,7(15)
O21	Ho1	Ho2	160,2(3)	C127	C66	C49	119,2(16)
O32	Ho1	Ho2	114,1(3)	O16	C67	O38	122,7(16)
O25	Ho1	Ho2	69,4(3)	O16	C67	C91	119,1(14)
O7	Ho1	Ho2	36,9(3)	O38	C67	C91	118,1(15)
O8	Ho1	Ho2	86,0(3)	C72	C69	C96	119,0(19)
O10	Ho1	Ho2	33,8(3)	C72	C69	C76	120,5(17)
C57	Ho1	Ho2	61,0(4)	C96	C69	C76	120,4(16)
O41	Ho1'	O33	170,4(4)	C139	C70	C71	118(2)
O41	Ho1'	O31	88,7(5)	C70	C71	C74	117,2(18)
O33	Ho1'	O31	99,7(5)	C70	C71	C73	121,4(17)
O41	Ho1'	O100	101,8(4)	C74	C71	C73	121,3(17)
O33	Ho1'	O100	83,7(4)	C69	C72	C150	119(2)
O31	Ho1'	O100	84,3(5)	O18	C73	O13	120,3(19)
O41	Ho1'	O12	86,5(5)	O18	C73	C71	119,2(17)
O33	Ho1'	O12	86,8(5)	O13	C73	C71	120,4(17)
O31	Ho1'	O12	161,9(4)	O18	C73	Ho2	67,4(11)
O100	Ho1'	O12	79,6(4)	O13	C73	Ho2	53,5(10)
O41	Ho1'	O35	89,3(4)	C71	C73	Ho2	167,8(14)
O33	Ho1'	O35	88,0(5)	C133	C74	C71	124(2)
O31	Ho1'	O35	77,3(4)	C106	C75	C45	122(2)
O100	Ho1'	O35	158,3(4)	O27	C76	O29	122,4(19)
O12	Ho1'	O35	120,0(4)	O27	C76	C69	120,1(16)
O41	Ho1'	O11	87,8(4)	O29	C76	C69	117,4(16)
O33	Ho1'	O11	83,2(4)	C88	C77	C122	119,2(16)
O31	Ho1'	O11	130,0(5)	C88	C77	C90	123,8(14)
O100	Ho1'	O11	144,8(5)	C122	C77	C90	117,1(14)
O12	Ho1'	O11	67,2(4)	C82	C78	C81	117,5(17)
O35	Ho1'	O11	52,8(4)	C82	C78	C85	119,6(15)
O41	Ho1'	C46	87,1(4)	C81	C78	C85	122,8(15)
O33	Ho1'	C46	86,3(4)	C97	C79	C80	119,7(19)
O31	Ho1'	C46	104,1(5)	C89	C80	C79	120,7(17)
O100	Ho1'	C46	167,9(5)	C95	C81	C78	120,1(17)
O12	Ho1'	C46	93,1(5)	C138	C82	C78	118,2(16)
O35	Ho1'	C46	27,0(5)	C86	C83	C84	121,2(18)
O11	Ho1'	C46	25,9(5)	C99	C84	C83	119,2(17)
O41	Ho1'	Ho2'	101,3(3)	O22	C85	O32	123,0(17)
O33	Ho1'	Ho2'	69,2(3)	O22	C85	C78	117,3(15)
O31	Ho1'	Ho2'	159,7(3)	O32	C85	C78	119,6(15)
O100	Ho1'	Ho2'	110,3(3)	C83	C86	C51	119,6(18)
O12	Ho1'	Ho2'	38,0(3)	C91	C87	C140	124,9(18)
O35	Ho1'	Ho2'	85,2(3)	C77	C88	C119	123,3(17)
O11	Ho1'	Ho2'	34,6(3)	C80	C89	C64	122(2)
C46	Ho1'	Ho2'	59,4(4)	O40	C90	O39	122,4(14)
O29	Ho3'	O42	173,9(6)	O40	C90	C77	121,2(14)
O29	Ho3'	O22	90,1(6)	O39	C90	C77	116,3(13)
O42	Ho3'	O22	84,2(5)	C87	C91	C143	118,7(18)
O29	Ho3'	O40	92,7(5)	C87	C91	C67	121,0(15)
O42	Ho3'	O40	89,4(5)	C143	C91	C67	119,9(16)
O22	Ho3'	O40	87,9(4)	C93	C92	C55	121(2)
O29	Ho3'	O61	87,2(7)	C92	C93	C155	119(2)

O42	Ho3'	O61	98,6(7)	C161	C94	C59	124,0(17)
O22	Ho3'	O61	172,1(8)	C81	C95	C136	124,7(19)
O40	Ho3'	O61	84,8(7)	C144	C96	C69	118,7(18)
O29	Ho3'	O38	88,0(6)	C79	C97	C117	120,3(19)
O42	Ho3'	O38	90,6(5)	C53	C98	C105	119,9(17)
O22	Ho3'	O38	99,4(5)	C84	C99	C50	121,1(17)
O40	Ho3'	O38	172,6(5)	C109	O100	Ho1'	130,3(11)
O61	Ho3'	O38	87,9(7)	C102	C101	C103	118,5(17)
O17	Ho3	O28	86,7(5)	C102	C101	C109	121,3(17)
O17	Ho3	O36	87,3(4)	C103	C101	C109	120,0(15)
O28	Ho3	O36	99,1(5)	C101	C102	C146	122,0(19)
O17	Ho3	O19	88,5(5)	C154	C103	C101	119,4(18)
O28	Ho3	O19	170,6(4)	C105	C104	C108	121(2)
O36	Ho3	O19	88,7(5)	C104	C105	C98	119(2)
O17	Ho3	O23	103,5(4)	C145	C106	C75	119(2)
O28	Ho3	O23	84,9(4)	C165	C107	C141	116,8(18)
O36	Ho3	O23	168,7(5)	C165	C107	C111	123,2(18)
O19	Ho3	O23	88,4(4)	C141	C107	C111	120,0(18)
O17	Ho3	O18	162,1(4)	C104	C108	C112	120,2(18)
O28	Ho3	O18	84,2(5)	O100	C109	O17	121,4(15)
O36	Ho3	O18	78,9(4)	O100	C109	C101	119,4(16)
O19	Ho3	O18	102,5(5)	O17	C109	C101	119,2(15)
O23	Ho3	O18	91,1(4)	O36	C110	O15	120,0(14)
O39	Ho2'	O14	164,1(5)	O36	C110	C121	119,9(14)
O39	Ho2'	O27	101,3(4)	O15	C110	C121	120,1(14)
O14	Ho2'	O27	84,8(4)	O14	C111	O33	122,0(14)
O39	Ho2'	O62	102,9(5)	O14	C111	C107	118,1(17)
O14	Ho2'	O62	92,3(6)	O33	C111	C107	119,7(17)
O27	Ho2'	O62	85,0(5)	C53	C112	C108	118,6(19)
O39	Ho2'	O11	81,9(5)	C132	C113	C121	119,5(16)
O14	Ho2'	O11	84,5(5)	C130	C114	C123	120(2)
O27	Ho2'	O11	81,7(4)	C125	C115	C128	120,1(18)
O62	Ho2'	O11	166,5(5)	C121	C116	C129	118,6(16)
O39	Ho2'	O24	89,4(5)	C64	C117	C97	119,1(17)
O14	Ho2'	O24	90,0(5)	C120	C118	C119	122,4(17)
O27	Ho2'	O24	158,1(5)	C118	C119	C88	117,5(17)
O62	Ho2'	O24	74,0(6)	C118	C120	C122	119,4(16)
O11	Ho2'	O24	119,0(5)	C116	C121	C113	121,3(15)
O39	Ho2'	O12	83,8(4)	C116	C121	C110	120,4(16)
O14	Ho2'	O12	83,0(4)	C113	C121	C110	118,0(15)
O27	Ho2'	O12	145,8(5)	C77	C122	C120	118,3(17)
O62	Ho2'	O12	127,3(5)	C126	C123	C114	122,0(18)
O11	Ho2'	O12	65,4(4)	C126	C123	C52	118,9(18)
O24	Ho2'	O12	53,6(5)	C114	C123	C52	118,9(19)
O39	Ho2'	C52	84,6(5)	C125	C124	C127	121,6(19)
O14	Ho2'	C52	87,9(5)	C124	C125	C115	120,8(17)
O27	Ho2'	C52	171,6(6)	C123	C126	C151	119(2)
O62	Ho2'	C52	99,6(7)	C66	C127	C124	116,4(19)
O11	Ho2'	C52	93,4(6)	C66	C128	C115	119,5(16)
O24	Ho2'	C52	25,7(6)	C134	C129	C116	120,0(17)
O12	Ho2'	C52	28,1(5)	C114	C130	C135	119(2)
O39	Ho2'	Ho1'	95,7(3)	C147	C131	C164	123(2)
O14	Ho2'	Ho1'	68,4(3)	C113	C132	C134	119,1(16)
O27	Ho2'	Ho1'	112,0(3)	C74	C133	C148	116(2)

O62	Ho2'	Ho1'	151,9(4)	C129	C134	C132	120,7(17)
O11	Ho2'	Ho1'	36,7(3)	C151	C135	C130	119,8(19)
O24	Ho2'	Ho1'	85,4(4)	C95	C136	C138	116,2(19)
O12	Ho2'	Ho1'	34,0(3)	C150	C137	C144	117(2)
C52	Ho2'	Ho1'	61,0(5)	C82	C138	C136	122,9(18)
C26	O7	Ho1	149,4(11)	C148	C139	C70	123(3)
C26	O7	Ho2	90,8(10)	C87	C140	C157	116,2(18)
Ho1	O7	Ho2	108,7(5)	C107	C141	C142	121(2)
C57	O8	Ho1	97,1(15)	C152	C142	C141	123(2)
C49	O9	Ho2	141,6(10)	C91	C143	C159	117,2(19)
C57	O10	Ho2	154,4(11)	C137	C144	C96	123(2)
C57	O10	Ho1	92,4(10)	C106	C145	C158	123(3)
Ho2	O10	Ho1	110,2(5)	C102	C146	C149	116,9(19)
C46	O11	Ho2'	148,7(11)	C131	C147	C60	118(2)
C46	O11	Ho1'	94,4(10)	C139	C148	C133	122(3)
Ho2'	O11	Ho1'	108,6(5)	C154	C149	C146	121(2)
C52	O12	Ho1'	152,8(11)	C137	C150	C72	122,5(19)
C52	O12	Ho2'	90,6(11)	C126	C151	C135	119(2)
Ho1'	O12	Ho2'	108,0(5)	C166	C152	C142	113(2)
C73	O13	Ho2	100,9(11)	C163	C153	C162	118(2)
C111	O14	Ho2'	140,9(11)	C149	C154	C103	122(2)
C110	O15	Ho2	147,6(10)	C93	C155	C156	122(2)
C67	O16	Ho1	148,6(13)	C160	C156	C155	117(3)
C109	O17	Ho3	165,0(13)	C159	C157	C140	120(2)
C73	O18	Ho3	135,7(11)	C145	C158	C44	118(3)
C73	O18	Ho2	86,5(11)	C157	C159	C143	123(2)
Ho3	O18	Ho2	119,7(5)	C156	C160	C55	123(2)
C34	O19	Ho3	137,6(12)	C94	C161	C54	119,9(17)
C30	O20	Ho2	144,4(12)	C169	C162	C153	121(2)
C63	O21	Ho1	153,9(12)	C153	C163	C65	122(2)
C85	O22	Ho3'	159,0(13)	C153	C163	C167	120(2)
C48	O23	Ho3	132,5(11)	C65	C163	C167	118(2)
C52	O24	Ho2'	99,0(15)	C47	C164	C131	116(2)
C49	O25	Ho1	135,8(11)	C107	C165	C166	118(3)
O7	C26	O37	121(2)	C152	C166	C165	127(3)
O7	C26	C45	118,2(16)	C168	C167	C163	119,8(19)
O37	C26	C45	121(2)	C167	C168	C169	119(2)
O7	C26	Ho2	62,7(11)	C162	C169	C168	119(2)

8.6 Benzoat-Benzoesäure-Addukte

8.6.1 Manganbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$

Tabelle 119. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{2/7}$.

Atom	x	y	z	Ueq
Mn2	1,21111(4)	0,20282(4)	0,66898(3)	0,02189(11)
Mn1	0,96446(4)	0,16635(3)	0,52605(3)	0,02066(11)

Mn3	1,29074(4)	-0,00533(4)	0,57493(3)	0,02173(11)
Mn4	1,5	0	1/2	0,02330(16)
O5	1,20873(16)	0,35781(15)	0,66795(14)	0,0290(5)
O6	1,21024(14)	0,04850(15)	0,67007(13)	0,0215(4)
O7	1,06776(15)	0,33048(15)	0,55396(14)	0,0253(5)
O8	1,09841(14)	0,11928(14)	0,52545(13)	0,0208(4)
O9	1,34876(17)	0,29637(16)	0,79325(15)	0,0315(5)
O10	0,81069(14)	0,18244(14)	0,49649(13)	0,0213(4)
O11	0,65817(15)	0,12237(15)	0,52563(14)	0,0292(5)
O12	1,14840(15)	-0,01309(14)	0,46511(13)	0,0216(4)
O13	1,40117(15)	0,09816(15)	0,52622(14)	0,0270(5)
O14	1,07449(15)	-0,10977(15)	0,62798(13)	0,0259(5)
O15	1,33726(15)	0,21111(16)	0,59903(14)	0,0296(5)
O16	1,3978(2)	0,46094(18)	0,78456(18)	0,0402(6)
H16	1,3378	0,4344	0,7485	0,10(2)
O17	0,97169(16)	0,22328(16)	0,67077(14)	0,0289(5)
O18	1,39873(17)	0,01111(19)	0,69607(15)	0,0381(6)
O19	1,54062(16)	0,02768(17)	0,64280(14)	0,0327(5)
O20	1,09769(17)	0,18199(18)	0,74213(16)	0,0357(5)
C21	1,0046(2)	0,2580(2)	0,8347(2)	0,0226(7)
C22	1,0257(2)	0,2178(2)	0,7424(2)	0,0256(7)
C23	0,9326(3)	0,3654(3)	0,9320(2)	0,0392(8)
H23	0,8935	0,4076	0,9387	0,0571(18)
C24	0,7744(2)	0,3047(2)	0,6159(2)	0,0227(6)
C25	1,1678(2)	0,5076(2)	0,6607(2)	0,0278(7)
C26	1,2015(4)	0,7225(3)	0,7265(3)	0,0761(15)
H26	1,2131	0,7948	0,7493	0,0571(18)
C27	0,8637(3)	0,3928(2)	0,6255(2)	0,0292(7)
H27	0,9067	0,3858	0,5862	0,0571(18)
C28	1,1456(2)	0,3903(2)	0,6245(2)	0,0231(6)
C29	1,4148(2)	0,3888(2)	0,8174(2)	0,0290(7)
C30	1,1729(2)	0,2206(2)	0,3996(2)	0,0284(7)
H30	1,1509	0,2576	0,4464	0,0571(18)
C31	1,2029(3)	0,0645(3)	0,3237(2)	0,0355(8)
H31	1,2008	-0,0033	0,319	0,0571(18)
C32	1,1276(2)	0,5529(2)	0,6030(2)	0,0296(7)
H32	1,0886	0,5107	0,541	0,0571(18)
C33	1,2354(3)	0,0782(2)	0,8601(2)	0,0314(7)
H33	1,2913	0,1197	0,8432	0,0571(18)
C34	1,6536(3)	0,3902(3)	0,9715(3)	0,0518(10)
H34	1,6764	0,3407	0,9878	0,0571(18)
C35	1,1697(2)	0,1192(2)	0,3938(2)	0,0237(7)
C36	1,1413(2)	-0,0245(2)	0,6896(2)	0,0212(6)
C37	0,7463(2)	0,1994(2)	0,5429(2)	0,0236(7)
C38	1,1467(2)	-0,0027(2)	0,7911(2)	0,0242(7)
C39	1,2085(3)	0,2669(3)	0,3362(2)	0,0350(8)
H39	1,2101	0,3344	0,3403	0,0571(18)
C40	0,9466(2)	0,3225(2)	0,8448(2)	0,0304(7)
H40	0,9175	0,3367	0,7933	0,0571(18)
C41	1,4959(2)	0,0321(2)	0,7076(2)	0,0269(7)
C42	1,5546(3)	0,3549(3)	0,9091(2)	0,0395(8)
H42	1,511	0,2821	0,8839	0,0571(18)
C43	1,2419(5)	0,6780(4)	0,7841(3)	0,116(3)
H43	1,281	0,7208	0,846	0,0571(18)

C44	1,6846(3)	0,5709(3)	0,9860(3)	0,0466(10)
H44	1,728	0,6438	1,0126	0,0571(18)
C45	1,1444(3)	0,6609(3)	0,6361(3)	0,0407(9)
H45	1,1167	0,6907	0,5965	0,0571(18)
C46	1,2391(3)	0,1112(3)	0,2607(2)	0,0477(10)
H46	1,2617	0,0746	0,214	0,0571(18)
C47	1,2260(4)	0,5712(3)	0,7525(3)	0,0712(14)
H47	1,2543	0,5422	0,7925	0,0571(18)
C48	1,0630(3)	-0,0649(3)	0,8161(2)	0,0354(8)
H48	1,0039	-0,1201	0,77	0,0571(18)
C49	1,5204(2)	0,4283(2)	0,8841(2)	0,0296(7)
C50	0,8886(3)	0,4921(3)	0,6942(2)	0,0381(8)
H50	0,948	0,5515	0,7007	0,0571(18)
C51	1,1569(3)	0,0367(3)	0,9790(2)	0,0462(10)
H51	1,16	0,0502	1,0421	0,0571(18)
C52	0,7109(3)	0,3149(3)	0,6760(2)	0,0320(8)
H52	0,6513	0,2558	0,6699	0,0571(18)
C53	1,0467(2)	0,2365(2)	0,9117(2)	0,0289(7)
H53	1,0846	0,1931	0,9052	0,0571(18)
C54	1,5858(3)	0,5371(3)	0,9227(2)	0,0377(8)
H54	1,5637	0,5869	0,9064	0,0571(18)
C55	1,7188(3)	0,4980(3)	1,0096(3)	0,0507(10)
H55	1,7855	0,5213	1,0511	0,0571(18)
C56	1,2406(3)	0,0973(3)	0,9551(2)	0,0427(9)
H56	1,3004	0,1507	1,0017	0,0571(18)
C57	1,0324(3)	0,2794(3)	0,9989(2)	0,0350(8)
H57	1,06	0,2641	1,0502	0,0571(18)
C58	0,8245(3)	0,5016(3)	0,7530(2)	0,0388(9)
H58	0,8408	0,568	0,7982	0,0571(18)
C59	0,7369(3)	0,4136(3)	0,7448(2)	0,0384(9)
H59	0,6953	0,4204	0,7855	0,0571(18)
C60	0,9770(3)	0,3450(3)	1,0086(2)	0,0431(9)
H60	0,9695	0,3758	1,0673	0,0571(18)
C61	1,1357(2)	0,0710(2)	0,46470(19)	0,0205(6)
C62	1,2419(3)	0,2117(3)	0,2667(2)	0,0435(9)
H62	1,2662	0,2425	0,2242	0,0571(18)
C63	1,0689(3)	-0,0434(3)	0,9113(2)	0,0448(9)
H63	1,013	-0,0836	0,9289	0,0571(18)
C64	1,3993(2)	0,1914(2)	0,5528(2)	0,0237(7)
C65	1,4727(2)	0,2778(2)	0,5286(2)	0,0269(7)
C66	1,5166(3)	0,2521(3)	0,4552(2)	0,0358(8)
H66	1,4968	0,1807	0,4183	0,0571(18)
C67	1,5018(3)	0,3847(3)	0,5820(2)	0,0362(8)
H67	1,4714	0,4023	0,63	0,0571(18)
C68	1,5759(3)	0,4655(3)	0,5645(3)	0,0486(10)
H68	1,5957	0,5372	0,6007	0,0571(18)
C69	1,6200(3)	0,4387(3)	0,4930(3)	0,0527(11)
H69	1,671	0,4926	0,4819	0,0571(18)
C70	1,5895(3)	0,3332(3)	0,4376(3)	0,0486(10)
H70	1,6181	0,3164	0,3881	0,0571(18)
C71	1,6734(3)	0,0953(3)	0,8211(2)	0,0355(8)
H71	1,7027	0,0978	0,7714	0,0571(18)
C72	1,7384(3)	0,1213(3)	0,9101(3)	0,0470(9)
H72	1,8107	0,1392	0,9196	0,0571(18)

C73	1,5654(2)	0,0656(2)	0,8057(2)	0,0276(7)
C74	1,5228(3)	0,0676(3)	0,8812(2)	0,0394(8)
H74	1,4505	0,05	0,872	0,0571(18)
C75	1,6961(3)	0,1208(3)	0,9841(3)	0,0510(10)
H75	1,7397	0,1371	1,0434	0,0571(18)
C76	1,5895(3)	0,0964(3)	0,9710(2)	0,0510(10)
H76	1,5617	0,099	1,0219	0,0571(18)

Tabelle 120. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Mn}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{27}$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Mn2	0,0202(3)	0,0209(2)	0,0244(3)	0,0061(2)	0,0073(2)	0,0090(2)
Mn1	0,0181(2)	0,0201(2)	0,0233(3)	0,0063(2)	0,0068(2)	0,0076(2)
Mn3	0,0180(2)	0,0223(2)	0,0248(3)	0,0066(2)	0,0081(2)	0,0084(2)
Mn4	0,0186(4)	0,0269(4)	0,0250(4)	0,0085(3)	0,0090(3)	0,0090(3)
O5	0,0288(12)	0,0222(11)	0,0351(12)	0,0087(9)	0,0036(10)	0,0131(10)
O6	0,0211(11)	0,0229(10)	0,0278(11)	0,0122(9)	0,0120(9)	0,0124(9)
O7	0,0221(11)	0,0202(10)	0,0323(12)	0,0094(9)	0,0064(10)	0,0072(9)
O8	0,0199(11)	0,0211(10)	0,0225(11)	0,0040(8)	0,0075(9)	0,0119(9)
O9	0,0294(13)	0,0249(11)	0,0306(12)	0,0046(9)	0,0035(10)	0,0061(10)
O10	0,0189(11)	0,0229(10)	0,0248(11)	0,0081(9)	0,0076(9)	0,0112(9)
O11	0,0200(11)	0,0239(11)	0,0380(13)	0,0059(9)	0,0109(10)	0,0048(9)
O12	0,0214(11)	0,0203(10)	0,0254(11)	0,0087(9)	0,0080(9)	0,0097(9)
O13	0,0254(11)	0,0224(11)	0,0354(12)	0,0115(9)	0,0119(10)	0,0097(9)
O14	0,0256(12)	0,0263(11)	0,0216(11)	0,0058(9)	0,0062(10)	0,0074(10)
O15	0,0200(11)	0,0358(12)	0,0339(12)	0,0107(10)	0,0148(10)	0,0099(10)
O16	0,0347(15)	0,0306(13)	0,0454(15)	0,0111(11)	-0,0011(13)	0,0090(11)
O17	0,0322(13)	0,0318(12)	0,0220(11)	0,0059(9)	0,0078(10)	0,0146(10)
O18	0,0270(13)	0,0631(16)	0,0319(13)	0,0191(12)	0,0114(11)	0,0239(12)
O19	0,0286(12)	0,0495(14)	0,0228(12)	0,0115(10)	0,0115(10)	0,0178(11)
O20	0,0390(14)	0,0449(13)	0,0462(14)	0,0253(11)	0,0278(12)	0,0292(12)
C21	0,0181(15)	0,0237(15)	0,0214(16)	0,0043(12)	0,0033(13)	0,0070(13)
C22	0,0245(17)	0,0223(15)	0,0296(18)	0,0067(14)	0,0117(15)	0,0090(14)
C23	0,045(2)	0,045(2)	0,0330(19)	0,0080(16)	0,0170(17)	0,0268(18)
C24	0,0200(16)	0,0246(15)	0,0236(16)	0,0071(13)	0,0048(13)	0,0108(13)
C25	0,0316(18)	0,0234(15)	0,0285(17)	0,0070(13)	0,0062(15)	0,0139(14)
C26	0,100(4)	0,024(2)	0,076(3)	-0,009(2)	-0,016(3)	0,033(2)
C27	0,0319(19)	0,0265(16)	0,0304(18)	0,0093(14)	0,0090(15)	0,0135(15)
C28	0,0229(16)	0,0207(15)	0,0274(17)	0,0087(13)	0,0101(14)	0,0092(13)
C29	0,0301(19)	0,0294(17)	0,0262(17)	0,0050(14)	0,0108(15)	0,0129(15)
C30	0,0268(17)	0,0273(16)	0,0312(17)	0,0118(14)	0,0128(15)	0,0075(14)
C31	0,053(2)	0,0335(18)	0,0312(18)	0,0132(15)	0,0219(17)	0,0243(17)
C32	0,0345(19)	0,0265(16)	0,0285(17)	0,0100(14)	0,0068(15)	0,0139(15)
C33	0,0330(19)	0,0325(17)	0,0259(17)	0,0070(14)	0,0061(15)	0,0136(15)
C34	0,041(2)	0,060(3)	0,058(3)	0,030(2)	0,008(2)	0,020(2)
C35	0,0224(16)	0,0220(15)	0,0258(16)	0,0087(13)	0,0094(14)	0,0063(13)
C36	0,0191(15)	0,0254(15)	0,0241(16)	0,0100(13)	0,0077(13)	0,0131(13)
C37	0,0207(16)	0,0260(16)	0,0273(17)	0,0123(13)	0,0060(14)	0,0109(13)
C38	0,0299(17)	0,0267(15)	0,0222(15)	0,0102(13)	0,0103(14)	0,0160(14)
C39	0,038(2)	0,0296(17)	0,043(2)	0,0206(16)	0,0191(17)	0,0094(15)
C40	0,0320(19)	0,0353(18)	0,0260(17)	0,0068(14)	0,0085(15)	0,0188(16)

C41	0,0281(18)	0,0281(16)	0,0272(17)	0,0091(14)	0,0076(15)	0,0150(15)
C42	0,031(2)	0,039(2)	0,042(2)	0,0133(17)	0,0041(17)	0,0102(17)
C43	0,181(6)	0,056(3)	0,062(3)	-0,033(2)	-0,065(4)	0,080(4)
C44	0,0267(19)	0,041(2)	0,048(2)	-0,0024(18)	0,0030(17)	0,0024(17)
C45	0,052(2)	0,0256(17)	0,050(2)	0,0165(17)	0,0137(19)	0,0196(17)
C46	0,075(3)	0,051(2)	0,040(2)	0,0244(18)	0,036(2)	0,036(2)
C47	0,116(4)	0,051(2)	0,038(2)	-0,0034(19)	-0,018(2)	0,057(3)
C48	0,042(2)	0,0368(18)	0,0309(18)	0,0132(15)	0,0173(17)	0,0149(16)
C49	0,0237(17)	0,0307(17)	0,0275(17)	0,0035(14)	0,0058(14)	0,0085(14)
C50	0,038(2)	0,0259(17)	0,042(2)	0,0062(15)	0,0045(17)	0,0103(16)
C51	0,069(3)	0,058(2)	0,0259(19)	0,0176(18)	0,018(2)	0,038(2)
C52	0,0300(19)	0,0400(19)	0,0308(18)	0,0124(15)	0,0098(15)	0,0192(16)
C53	0,0269(18)	0,0254(16)	0,0297(18)	0,0080(14)	0,0040(14)	0,0079(14)
C54	0,0289(19)	0,0346(19)	0,038(2)	0,0018(15)	0,0076(16)	0,0078(16)
C55	0,028(2)	0,066(3)	0,045(2)	0,015(2)	0,0021(17)	0,011(2)
C56	0,052(2)	0,046(2)	0,0249(18)	0,0050(16)	0,0017(18)	0,0238(19)
C57	0,038(2)	0,0401(19)	0,0211(17)	0,0083(14)	0,0055(15)	0,0112(16)
C58	0,042(2)	0,0338(19)	0,0306(19)	-0,0052(15)	0,0014(17)	0,0205(17)
C59	0,040(2)	0,044(2)	0,0279(18)	0,0006(16)	0,0111(17)	0,0224(18)
C60	0,049(2)	0,048(2)	0,0262(19)	0,0031(16)	0,0126(17)	0,0190(19)
C61	0,0147(15)	0,0187(15)	0,0231(15)	0,0040(12)	0,0017(12)	0,0050(12)
C62	0,055(2)	0,048(2)	0,041(2)	0,0257(18)	0,0282(19)	0,0218(19)
C63	0,059(3)	0,051(2)	0,038(2)	0,0262(19)	0,026(2)	0,024(2)
C64	0,0190(16)	0,0259(16)	0,0268(17)	0,0113(13)	0,0055(14)	0,0086(13)
C65	0,0197(16)	0,0275(16)	0,0341(18)	0,0138(14)	0,0087(14)	0,0074(14)
C66	0,035(2)	0,0388(19)	0,047(2)	0,0247(17)	0,0200(17)	0,0188(16)
C67	0,0300(19)	0,0308(18)	0,045(2)	0,0151(16)	0,0091(17)	0,0086(15)
C68	0,045(2)	0,0298(19)	0,066(3)	0,0209(19)	0,014(2)	0,0063(17)
C69	0,038(2)	0,047(2)	0,083(3)	0,042(2)	0,024(2)	0,0109(19)
C70	0,044(2)	0,063(3)	0,064(3)	0,043(2)	0,033(2)	0,027(2)
C71	0,0293(19)	0,0375(19)	0,0352(19)	0,0089(16)	0,0016(16)	0,0146(16)
C72	0,033(2)	0,050(2)	0,046(2)	0,0051(18)	-0,0056(18)	0,0193(18)
C73	0,0306(18)	0,0313(17)	0,0203(16)	0,0065(13)	0,0036(14)	0,0155(15)
C74	0,041(2)	0,044(2)	0,0328(19)	0,0123(16)	0,0125(17)	0,0174(17)
C75	0,057(3)	0,053(2)	0,032(2)	0,0054(18)	-0,0063(19)	0,024(2)
C76	0,070(3)	0,052(2)	0,0245(19)	0,0094(17)	0,009(2)	0,021(2)

Tabelle 121. Atomabstände/Å von Mn(OBz)₂(HOBz)_{2/7}.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Mn2	O20	2,082(2)	C24	C52	1,398(4)
Mn2	O6	2,1755(19)	C24	C37	1,477(4)
Mn2	O9	2,191(2)	C25	C32	1,375(4)
Mn2	O5	2,200(2)	C25	C47	1,379(4)
Mn2	O15	2,2013(19)	C25	C28	1,498(4)
Mn2	O8	2,221(2)	C26	C45	1,356(5)
Mn1	O17	2,128(2)	C26	C43	1,365(6)
Mn1	O7	2,1566(19)	C27	C50	1,396(4)
Mn1	O8	2,1808(19)	C29	C49	1,473(4)
Mn1	O14	2,195(2)	C30	C39	1,386(4)
Mn1	O10	2,2151(19)	C30	C35	1,393(4)

Mn1	O12	2,2668(19)	C31	C46	1,387(4)
Mn3	O18	2,095(2)	C31	C35	1,388(4)
Mn3	O6	2,1224(18)	C32	C45	1,391(4)
Mn3	O13	2,1351(19)	C33	C38	1,386(4)
Mn3	O10	2,2545(19)	C33	C56	1,400(4)
Mn3	O11	2,323(2)	C34	C55	1,378(5)
Mn3	O12	2,332(2)	C34	C42	1,384(5)
Mn4	O19	2,070(2)	C35	C61	1,498(4)
Mn4	O19	2,070(2)	C36	C38	1,494(4)
Mn4	O11	2,1928(19)	C38	C48	1,392(4)
Mn4	O11	2,1928(19)	C39	C62	1,388(4)
Mn4	O13	2,264(2)	C41	C73	1,504(4)
Mn4	O13	2,264(2)	C42	C49	1,388(5)
O5	C28	1,291(3)	C43	C47	1,378(5)
O6	C36	1,298(3)	C44	C55	1,373(5)
O7	C28	1,252(3)	C44	C54	1,391(5)
O8	C61	1,289(3)	C46	C62	1,381(5)
O9	C29	1,229(3)	C48	C63	1,398(4)
O10	C37	1,281(3)	C49	C54	1,389(4)
O10	Mn3	2,2545(19)	C50	C58	1,387(4)
O11	C37	1,268(3)	C51	C63	1,370(5)
O11	Mn4	2,1928(19)	C51	C56	1,372(5)
O11	Mn3	2,323(2)	C52	C59	1,387(4)
O12	C61	1,257(3)	C53	C57	1,392(4)
O12	Mn1	2,2668(18)	C57	C60	1,383(5)
O13	C64	1,277(3)	C58	C59	1,381(5)
O14	C36	1,246(3)	C64	C65	1,490(4)
O14	Mn1	2,195(2)	C65	C67	1,386(4)
O15	C64	1,262(3)	C65	C66	1,394(4)
O16	C29	1,320(4)	C66	C70	1,380(4)
O17	C22	1,263(4)	C67	C68	1,386(4)
O18	C41	1,257(3)	C68	C69	1,375(5)
O19	C41	1,262(3)	C69	C70	1,375(5)
O20	C22	1,265(4)	C71	C73	1,382(4)
C21	C53	1,387(4)	C71	C72	1,387(5)
C21	C40	1,400(4)	C72	C75	1,370(5)
C21	C22	1,499(4)	C73	C74	1,391(4)
C23	C60	1,384(5)	C74	C76	1,399(5)
C23	C40	1,391(4)	C75	C76	1,375(5)
C24	C27	1,389(4)			

Tabelle 122. Winkel/° von Mn(OBz)₂(HOBz)_{2/7}.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O20	Mn2	O6	87,37(8)	C53	C21	C22	120,6(3)
O20	Mn2	O9	96,17(9)	C40	C21	C22	119,8(3)
O6	Mn2	O9	94,16(8)	O17	C22	O20	124,6(3)
O20	Mn2	O5	91,64(8)	O17	C22	C21	118,0(3)
O6	Mn2	O5	178,87(8)	O20	C22	C21	117,3(3)
O9	Mn2	O5	86,49(8)	C60	C23	C40	119,9(3)
O20	Mn2	O15	172,73(9)	C27	C24	C52	120,1(3)

O6	Mn2	O15	86,02(7)	C27	C24	C37	120,4(3)
O9	Mn2	O15	81,31(8)	C52	C24	C37	119,5(3)
O5	Mn2	O15	95,00(8)	C32	C25	C47	119,0(3)
O20	Mn2	O8	96,72(8)	C32	C25	C28	120,0(3)
O6	Mn2	O8	88,77(7)	C47	C25	C28	121,0(3)
O9	Mn2	O8	166,90(7)	C45	C26	C43	119,8(4)
O5	Mn2	O8	90,81(7)	C24	C27	C50	119,7(3)
O15	Mn2	O8	86,16(7)	O7	C28	O5	124,5(3)
O17	Mn1	O7	84,30(8)	O7	C28	C25	117,9(3)
O17	Mn1	O8	104,23(8)	O5	C28	C25	117,6(3)
O7	Mn1	O8	90,16(7)	O9	C29	O16	122,9(3)
O17	Mn1	O14	168,36(8)	O9	C29	C49	123,0(3)
O7	Mn1	O14	97,89(8)	O16	C29	C49	114,2(3)
O8	Mn1	O14	87,24(7)	C39	C30	C35	120,7(3)
O17	Mn1	O10	86,46(8)	C46	C31	C35	120,0(3)
O7	Mn1	O10	98,40(7)	C25	C32	C45	121,0(3)
O8	Mn1	O10	166,98(7)	C38	C33	C56	119,8(3)
O14	Mn1	O10	81,91(7)	C55	C34	C42	120,5(4)
O17	Mn1	O12	80,79(7)	C31	C35	C30	119,3(3)
O7	Mn1	O12	164,80(7)	C31	C35	C61	119,9(3)
O8	Mn1	O12	96,31(7)	C30	C35	C61	120,7(3)
O14	Mn1	O12	96,15(7)	O14	C36	O6	122,6(3)
O10	Mn1	O12	77,83(7)	O14	C36	C38	120,8(2)
O18	Mn3	O6	84,40(8)	O6	C36	C38	116,6(2)
O18	Mn3	O13	97,42(8)	O11	C37	O10	118,1(3)
O6	Mn3	O13	123,76(7)	O11	C37	C24	120,7(2)
O18	Mn3	O10	106,58(9)	O10	C37	C24	121,2(2)
O6	Mn3	O10	103,68(7)	C33	C38	C48	120,2(3)
O13	Mn3	O10	128,53(7)	C33	C38	C36	120,1(3)
O18	Mn3	O11	93,89(8)	C48	C38	C36	119,7(3)
O6	Mn3	O11	159,34(7)	C30	C39	C62	119,6(3)
O13	Mn3	O11	76,89(7)	C23	C40	C21	119,9(3)
O10	Mn3	O11	57,02(7)	O18	C41	O19	125,0(3)
O18	Mn3	O12	166,39(7)	O18	C41	C73	118,2(3)
O6	Mn3	O12	82,03(7)	O19	C41	C73	116,8(3)
O13	Mn3	O12	91,08(7)	C34	C42	C49	120,0(3)
O10	Mn3	O12	75,73(7)	C26	C43	C47	121,4(4)
O11	Mn3	O12	98,40(7)	C55	C44	C54	120,8(3)
O19	Mn4	O19	180,000(1)	C26	C45	C32	119,5(3)
O19	Mn4	O11	93,18(8)	C62	C46	C31	120,4(3)
O19	Mn4	O11	86,82(8)	C43	C47	C25	119,3(4)
O19	Mn4	O11	86,82(8)	C38	C48	C63	119,1(3)
O19	Mn4	O11	93,18(8)	C42	C49	C54	119,5(3)
O11	Mn4	O11	180,00(11)	C42	C49	C29	119,1(3)
O19	Mn4	O13	87,89(8)	C54	C49	C29	121,4(3)
O19	Mn4	O13	92,11(8)	C58	C50	C27	119,7(3)
O11	Mn4	O13	77,02(7)	C63	C51	C56	121,1(3)
O11	Mn4	O13	102,98(7)	C59	C52	C24	119,8(3)
O19	Mn4	O13	92,11(8)	C21	C53	C57	120,5(3)
O19	Mn4	O13	87,89(8)	C49	C54	C44	119,5(3)
O11	Mn4	O13	102,98(7)	C44	C55	C34	119,6(4)
O11	Mn4	O13	77,02(7)	C51	C56	C33	119,5(3)
O13	Mn4	O13	180	C60	C57	C53	119,6(3)
C28	O5	Mn2	136,93(18)	C59	C58	C50	120,7(3)

C36	O6	Mn3	116,82(17)	C58	C59	C52	119,9(3)
C36	O6	Mn2	128,11(17)	C57	C60	C23	120,6(3)
Mn3	O6	Mn2	109,63(8)	O12	C61	O8	122,2(3)
C28	O7	Mn1	126,88(19)	O12	C61	C35	118,6(2)
C61	O8	Mn1	138,09(18)	O8	C61	C35	119,1(3)
C61	O8	Mn2	113,50(17)	C46	C62	C39	120,1(3)
Mn1	O8	Mn2	107,49(7)	C51	C63	C48	120,2(3)
C29	O9	Mn2	130,2(2)	O15	C64	O13	121,3(3)
C37	O10	Mn1	136,75(19)	O15	C64	C65	120,1(3)
C37	O10	Mn3	93,68(16)	O13	C64	C65	118,5(3)
Mn1	O10	Mn3	96,34(7)	C67	C65	C66	119,5(3)
C37	O11	Mn4	174,88(19)	C67	C65	C64	119,9(3)
C37	O11	Mn3	90,88(16)	C66	C65	C64	120,6(3)
Mn4	O11	Mn3	93,91(7)	C70	C66	C65	119,7(3)
C61	O12	Mn1	130,09(17)	C68	C67	C65	120,4(3)
C61	O12	Mn3	120,76(17)	C69	C68	C67	119,4(3)
Mn1	O12	Mn3	92,80(7)	C70	C69	C68	120,8(3)
C64	O13	Mn3	109,38(17)	C69	C70	C66	120,2(4)
C64	O13	Mn4	147,29(18)	C73	C71	C72	120,4(3)
Mn3	O13	Mn4	97,21(8)	C75	C72	C71	120,1(3)
C36	O14	Mn1	131,60(18)	C71	C73	C74	119,5(3)
C64	O15	Mn2	166,1(2)	C71	C73	C41	119,4(3)
C22	O17	Mn1	131,5(2)	C74	C73	C41	121,1(3)
C41	O18	Mn3	126,2(2)	C73	C74	C76	119,5(3)
C41	O19	Mn4	137,7(2)	C72	C75	C76	120,3(3)
C22	O20	Mn2	128,78(19)	C75	C76	C74	120,1(4)
C53	C21	C40	119,5(3)				

8.6.2 Praseodymbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$

Tabelle 123. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

Atom	x	y	z	Ueq
Pr	1,01066(3)	0,251768(10)	0,338998(12)	0,05467(14)
O2	0,6681(4)	0,31012(13)	0,35085(13)	0,0566(8)
O3	0,8747(3)	0,33172(14)	0,32317(13)	0,0586(8)
O4	1,3865(4)	0,30714(14)	0,40893(13)	0,0613(9)
O5	1,1724(4)	0,30756(14)	0,38087(15)	0,0650(9)
O6	1,3614(3)	0,31963(14)	0,29860(15)	0,0621(9)
O7	0,9069(3)	0,28148(14)	0,42244(13)	0,0590(8)
O8	1,1482(4)	0,29967(15)	0,27415(14)	0,0644(9)
O9	0,9076(4)	0,22982(16)	0,25333(14)	0,0624(9)
O10	1,0629(5)	0,24871(17)	0,19381(18)	0,0774(12)
H10	1,0897	0,2703	0,215	0,11(2)
O11	1,0110(5)	0,24299(19)	0,4878(2)	0,0798(14)
H11	1,0519	0,2273	0,4651	0,11(2)
C12	0,7593(5)	0,3439(2)	0,33994(18)	0,0512(11)
C13	1,2413(6)	0,3791(2)	0,4327(2)	0,0647(14)
C14	0,9464(5)	0,2258(2)	0,2097(2)	0,0600(13)
C15	1,2678(5)	0,3275(2)	0,4060(2)	0,0566(13)
C16	0,7251(5)	0,4022(2)	0,3492(2)	0,0566(13)
C17	1,2552(5)	0,3302(2)	0,2743(2)	0,0593(12)

C18	0,8701(6)	0,1961(2)	0,1705(2)	0,0594(12)
C19	1,2501(6)	0,3806(2)	0,2443(2)	0,0640(13)
C20	0,7492(5)	0,1710(2)	0,1835(2)	0,0605(12)
H20	0,7208	0,1707	0,217	0,109(7)
C21	0,9263(5)	0,2777(2)	0,4684(2)	0,0575(12)
C022	0,6041(5)	0,4161(2)	0,37052(17)	0,0569(12)
H22	0,5398	0,3896	0,3778	0,136(10)
C23	0,6700(6)	0,1461(2)	0,1471(2)	0,0671(14)
H23	0,5872	0,13	0,1557	0,109(7)
C24	1,3393(7)	0,4018(3)	0,4636(2)	0,0761(17)
H24	1,4233	0,3847	0,4678	0,109(7)
C25	0,7154(8)	0,1455(3)	0,0975(2)	0,0774(19)
H25	0,6629	0,1287	0,0728	0,109(7)
C26	0,7640(5)	0,3517(2)	0,4870(2)	0,0654(14)
H26	0,7488	0,3552	0,4526	0,109(7)
C27	0,5744(6)	0,4700(2)	0,3817(2)	0,0712(15)
H27	0,4897	0,4791	0,3953	0,136(10)
C28	1,1198(7)	0,4057(3)	0,4258(3)	0,096(2)
H28	1,0532	0,3914	0,4046	0,109(7)
C29	0,8542(6)	0,3128(2)	0,50460(19)	0,0603(12)
C31	0,6966(6)	0,3851(3)	0,5203(2)	0,0752(16)
H31	0,6383	0,4119	0,5085	0,109(7)
C32	0,8352(9)	0,1691(3)	0,0848(2)	0,089(2)
H32	0,8645	0,1682	0,0515	0,109(7)
C33	0,9150(7)	0,1945(3)	0,1208(2)	0,0795(17)
H33	0,9978	0,2103	0,1118	0,109(7)
C34	1,3677(13)	0,4535(3)	0,2045(3)	0,121(3)
H34	1,4491	0,4711	0,1967	0,109(7)
C36	0,7176(7)	0,3780(3)	0,5722(3)	0,088(2)
H36	0,6691	0,3989	0,5951	0,109(7)
C37	1,3723(8)	0,4068(2)	0,2324(2)	0,0828(19)
H37	1,4559	0,3929	0,2431	0,109(7)
C39	1,0961(10)	0,4540(4)	0,4505(5)	0,155(5)
H39	1,0128	0,4716	0,4461	0,109(7)
C40	1,1307(13)	0,4495(4)	0,1993(4)	0,153(5)
H40	1,049	0,4641	0,1875	0,109(7)
C41	0,6675(8)	0,5081(3)	0,3727(4)	0,115(3)
H41	0,6497	0,5437	0,3814	0,136(10)
C42	1,1272(9)	0,4011(3)	0,2289(3)	0,098(2)
H42	1,0448	0,3845	0,2371	0,136(10)
C43	0,8757(7)	0,3080(3)	0,5558(2)	0,0870(19)
H43	0,9365	0,2822	0,568	0,136(10)
C44	0,8072(11)	0,3412(4)	0,5889(3)	0,102(3)
H44	0,8233	0,3381	0,6233	0,136(10)
C45	1,3142(10)	0,4501(3)	0,4884(3)	0,110(3)
H45	1,3796	0,4647	0,51	0,136(10)
C46	0,8215(9)	0,4409(3)	0,3402(4)	0,127(4)
H46	0,907	0,4317	0,3274	0,136(10)
C47	1,1920(13)	0,4759(4)	0,4808(5)	0,149(5)
H47	1,175	0,5087	0,4966	0,136(10)
C48	0,7891(11)	0,4944(4)	0,3506(6)	0,187(7)
H48	0,8515	0,5213	0,3423	0,136(10)
C49	1,2501(15)	0,4739(4)	0,1884(3)	0,151(6)
H49	1,2501	0,5053	0,1694	0,136(10)

Tabelle 124. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Pr	0,04067(18)	0,0545(2)	0,0688(2)	-0,00187(13)	0,00132(11)	0,00119(12)
O2	0,052(2)	0,0528(19)	0,065(2)	0,0013(16)	-0,0011(16)	-0,0029(16)
O3	0,0493(19)	0,060(2)	0,067(2)	0,0063(16)	0,0102(16)	0,0028(16)
O4	0,0503(19)	0,059(2)	0,075(2)	-0,0007(16)	0,0053(16)	0,0041(17)
O5	0,049(2)	0,059(2)	0,088(3)	-0,0089(19)	-0,0022(19)	-0,0031(16)
O6	0,0427(18)	0,061(2)	0,082(2)	0,0109(18)	-0,0008(17)	0,0017(16)
O7	0,053(2)	0,070(2)	0,0540(19)	0,0027(16)	-0,0054(16)	0,0051(17)
O8	0,0502(19)	0,070(2)	0,073(2)	-0,0014(18)	0,0065(17)	-0,0021(18)
O9	0,0466(19)	0,075(2)	0,065(2)	-0,0011(18)	0,0026(17)	0,0015(17)
O10	0,066(3)	0,087(3)	0,079(3)	0,004(2)	0,015(2)	-0,014(2)
O11	0,083(3)	0,088(3)	0,068(3)	0,007(2)	-0,005(2)	0,027(2)
C12	0,045(3)	0,055(3)	0,054(3)	0,007(2)	-0,006(2)	-0,001(2)
C13	0,059(3)	0,060(3)	0,075(3)	-0,008(3)	0,021(3)	-0,005(3)
C14	0,049(3)	0,064(3)	0,067(3)	0,007(3)	0,008(3)	0,003(2)
C15	0,049(3)	0,056(3)	0,065(3)	0,003(2)	0,005(2)	0,003(2)
C16	0,047(3)	0,053(3)	0,069(3)	0,005(2)	-0,001(2)	0,000(2)
C17	0,050(3)	0,058(3)	0,070(3)	-0,002(2)	0,000(3)	0,001(2)
C18	0,064(3)	0,051(3)	0,064(3)	0,004(2)	0,006(2)	0,002(2)
C19	0,078(4)	0,057(3)	0,057(3)	-0,002(2)	-0,007(3)	0,000(3)
C20	0,062(3)	0,055(3)	0,065(3)	0,002(2)	0,010(3)	0,005(3)
C21	0,049(3)	0,056(3)	0,068(3)	0,013(2)	-0,002(2)	-0,002(2)
C022	0,062(3)	0,059(3)	0,049(3)	0,008(2)	-0,007(2)	0,008(2)
C23	0,073(4)	0,060(3)	0,068(3)	-0,007(3)	0,009(3)	-0,005(3)
C24	0,089(4)	0,081(4)	0,058(3)	-0,016(3)	0,016(3)	-0,018(3)
C25	0,108(5)	0,065(4)	0,059(3)	-0,002(3)	0,006(3)	-0,011(4)
C26	0,063(3)	0,073(4)	0,060(3)	-0,006(3)	-0,007(3)	0,009(3)
C27	0,073(4)	0,061(3)	0,079(4)	0,003(3)	0,008(3)	0,012(3)
C28	0,066(4)	0,071(4)	0,151(7)	-0,031(4)	0,020(4)	0,002(3)
C29	0,062(3)	0,065(3)	0,054(3)	0,006(2)	-0,001(2)	-0,002(2)
C31	0,071(3)	0,084(4)	0,070(4)	-0,015(3)	-0,005(3)	0,011(3)
C32	0,126(6)	0,085(5)	0,055(4)	-0,005(3)	0,030(4)	-0,020(5)
C33	0,095(5)	0,086(4)	0,057(3)	-0,002(3)	0,021(3)	-0,017(4)
C34	0,223(12)	0,073(5)	0,067(5)	0,014(4)	0,025(6)	-0,024(6)
C36	0,078(4)	0,113(6)	0,073(4)	-0,022(4)	0,003(3)	0,004(4)
C37	0,111(5)	0,062(3)	0,075(4)	0,003(3)	0,021(4)	-0,001(3)
C39	0,093(6)	0,090(6)	0,283(14)	-0,063(8)	0,059(8)	0,010(5)
C40	0,218(12)	0,083(6)	0,159(9)	-0,015(6)	-0,135(9)	0,035(7)
C41	0,102(6)	0,059(4)	0,183(9)	-0,018(5)	0,045(6)	0,000(4)
C42	0,117(6)	0,071(4)	0,106(5)	-0,007(4)	-0,057(5)	0,012(4)
C43	0,106(5)	0,101(5)	0,054(3)	0,004(3)	-0,003(3)	0,025(4)
C44	0,120(6)	0,129(7)	0,057(4)	0,005(4)	0,001(4)	0,013(6)
C45	0,137(7)	0,101(6)	0,093(5)	-0,039(4)	0,051(5)	-0,038(5)
C46	0,086(6)	0,060(4)	0,236(11)	-0,011(5)	0,065(6)	-0,016(4)
C47	0,150(9)	0,089(6)	0,207(12)	-0,071(7)	0,095(9)	-0,033(6)
C48	0,122(8)	0,061(5)	0,38(2)	-0,020(8)	0,113(10)	-0,022(5)
C49	0,302(18)	0,066(5)	0,084(6)	0,006(4)	-0,082(9)	-0,014(7)

Tabelle 125. Atomabstände/Å von Pr(OBz)₃(HOBz)₂.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Pr	O2	2,347(3)	C17	C19	1,484(8)
Pr	O5	2,376(4)	C18	C20	1,378(7)
Pr	O6	2,420(3)	C18	C33	1,389(7)
Pr	O3	2,426(3)	C19	C42	1,366(9)
Pr	O8	2,486(4)	C19	C37	1,395(9)
Pr	O7	2,544(3)	C20	C23	1,384(8)
Pr	O9	2,544(4)	C21	C29	1,477(7)
Pr	O4	2,568(3)	C022	C27	1,400(7)
O2	C12	1,256(6)	C23	C25	1,388(8)
O2	Pr	2,347(3)	C24	C45	1,391(9)
O3	C12	1,248(5)	C25	C32	1,350(10)
O4	C15	1,267(6)	C26	C31	1,379(8)
O4	Pr	2,568(3)	C26	C29	1,387(7)
O5	C15	1,248(6)	C27	C41	1,335(9)
O6	C17	1,248(6)	C28	C39	1,387(10)
O6	Pr	2,420(3)	C29	C43	1,381(8)
O7	C21	1,238(6)	C31	C36	1,403(9)
O8	C17	1,290(6)	C32	C33	1,385(9)
O9	C14	1,221(6)	C34	C49	1,324(14)
O10	C14	1,339(7)	C34	C37	1,379(9)
O11	C21	1,300(6)	C36	C44	1,339(12)
C12	C16	1,508(8)	C39	C47	1,348(15)
C13	C28	1,370(8)	C40	C49	1,345(15)
C13	C24	1,380(8)	C40	C42	1,435(12)
C13	C15	1,488(8)	C41	C48	1,367(11)
C14	C18	1,478(8)	C43	C44	1,378(10)
C16	C022	1,354(7)	C45	C47	1,369(15)
C16	C46	1,365(9)	C46	C48	1,396(12)

Tabelle 126. Winkel/° von Pr(OBz)₃(HOBz)₂.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O2	Pr	O5	144,43(12)	O5	C15	C13	117,9(5)
O2	Pr	O6	87,82(11)	O4	C15	C13	118,3(5)
O5	Pr	O6	107,02(12)	C022	C16	C46	119,5(6)
O2	Pr	O3	98,87(11)	C022	C16	C12	120,5(5)
O5	Pr	O3	88,02(12)	C46	C16	C12	119,7(5)
O6	Pr	O3	143,72(12)	O6	C17	O8	123,3(5)
O2	Pr	O8	143,90(12)	O6	C17	C19	118,8(5)
O5	Pr	O8	71,67(13)	O8	C17	C19	117,9(5)
O6	Pr	O8	76,49(12)	C20	C18	C33	119,7(5)
O3	Pr	O8	77,45(12)	C20	C18	C14	118,7(5)
O2	Pr	O7	77,17(12)	C33	C18	C14	121,6(5)
O5	Pr	O7	71,81(12)	C42	C19	C37	120,5(7)
O6	Pr	O7	143,48(12)	C42	C19	C17	120,4(6)
O3	Pr	O7	72,25(11)	C37	C19	C17	119,1(5)
O8	Pr	O7	132,69(12)	C18	C20	C23	120,3(5)

O2	Pr	O9	71,68(12)	O7	C21	O11	122,5(5)
O5	Pr	O9	143,61(13)	O7	C21	C29	121,5(5)
O6	Pr	O9	69,57(12)	O11	C21	C29	116,0(5)
O3	Pr	O9	78,77(12)	C16	C022	C27	120,9(5)
O8	Pr	O9	72,40(12)	C20	C23	C25	119,4(6)
O7	Pr	O9	133,04(11)	C13	C24	C45	120,8(7)
O2	Pr	O4	79,60(11)	C32	C25	C23	120,5(6)
O5	Pr	O4	74,68(12)	C31	C26	C29	120,4(5)
O6	Pr	O4	72,56(12)	C41	C27	C022	120,1(6)
O3	Pr	O4	143,69(12)	C13	C28	C39	119,9(8)
O8	Pr	O4	124,23(12)	C43	C29	C26	119,3(5)
O7	Pr	O4	72,07(11)	C43	C29	C21	121,0(5)
O9	Pr	O4	132,65(12)	C26	C29	C21	119,7(5)
C12	O2	Pr	158,9(3)	C26	C31	C36	118,9(6)
C12	O3	Pr	129,0(3)	C25	C32	C33	120,8(6)
C15	O4	Pr	122,7(3)	C32	C33	C18	119,4(6)
C15	O5	Pr	167,7(4)	C49	C34	C37	121,6(10)
C17	O6	Pr	144,2(3)	C44	C36	C31	120,3(7)
C21	O7	Pr	140,7(3)	C34	C37	C19	119,2(8)
C17	O8	Pr	135,8(3)	C47	C39	C28	121,1(9)
C14	O9	Pr	137,9(3)	C49	C40	C42	121,1(9)
O3	C12	O2	124,0(5)	C27	C41	C48	119,3(7)
O3	C12	C16	119,4(4)	C19	C42	C40	117,1(9)
O2	C12	C16	116,6(4)	C44	C43	C29	120,0(6)
C28	C13	C24	118,8(6)	C36	C44	C43	121,1(6)
C28	C13	C15	120,2(6)	C47	C45	C24	119,2(9)
C24	C13	C15	121,0(5)	C16	C46	C48	118,8(7)
O9	C14	O10	121,8(5)	C39	C47	C45	120,2(8)
O9	C14	C18	123,5(5)	C41	C48	C46	121,2(8)
O10	C14	C18	114,7(5)	C34	C49	C40	120,6(9)
O5	C15	O4	123,7(5)				

8.6.3 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$

Tabelle 127. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Atom	x	y	y	z	Ueq
Eu1	1,27530(7)	0,15889(2)	0,15889(2)	0,24573(3)	0,03341(17)
Eu2	0,76860(7)	0,14121(2)	0,14121(2)	0,20313(3)	0,03418(17)
O3	1,3436(11)	0,1138(3)	0,1138(3)	0,3372(4)	0,046(2)
O4	0,9386(9)	0,1771(3)	0,1771(3)	0,2900(3)	0,040(2)
O5	0,6250(10)	0,1773(3)	0,1773(3)	0,2887(3)	0,041(2)
O6	0,7645(9)	0,0806(3)	0,0806(3)	0,2867(3)	0,0367(19)
O7	0,7801(10)	0,2312(3)	0,2312(3)	0,1863(3)	0,0374(19)
O8	0,5053(10)	0,1947(3)	0,1947(3)	0,1733(3)	0,0361(19)
O9	1,0661(10)	0,1571(3)	0,1571(3)	0,1547(3)	0,041(2)
O10	0,7140(10)	0,0643(3)	0,0643(3)	0,1569(4)	0,046(2)
O11	0,4653(9)	0,0997(3)	0,0997(3)	0,1921(3)	0,0352(18)
O12	1,0362(10)	0,0902(3)	0,0902(3)	0,2425(3)	0,0344(19)
O13	1,2335(12)	0,2448(3)	0,2448(3)	0,2549(4)	0,050(2)

O14	1,5552(11)	0,0637(3)	0,0637(3)	0,3791(4)	0,054(2)
H14	1,6218	0,0729	0,0729	0,3527	0,04(3)
C15	0,9803(14)	0,1540(4)	0,1540(4)	0,1023(5)	0,036(3)
O16	0,8021(9)	0,1524(3)	0,1524(3)	0,0974(3)	0,041(2)
C17	0,5377(16)	0,0670(4)	0,0670(4)	0,1605(5)	0,038(3)
C18	1,3061(17)	0,3248(4)	0,3248(4)	0,2771(5)	0,043(3)
C19	0,7941(16)	0,2075(4)	0,2075(4)	0,3752(5)	0,039(3)
C20	0,6087(15)	0,2310(4)	0,2310(4)	0,1676(5)	0,034(3)
C21	0,9948(17)	0,0184(4)	0,0184(4)	0,2935(5)	0,038(3)
C22	1,327(2)	0,0470(4)	0,0470(4)	0,4720(5)	0,051(3)
H22	1,4447	0,0321	0,0321	0,471	0,064(7)
C23	0,4888(15)	0,0008(4)	0,0008(4)	0,0890(5)	0,037(3)
H23	0,62	-0,0017	-0,0017	0,0866	0,064(7)
C24	0,7875(14)	0,1859(4)	0,1859(4)	0,3152(5)	0,037(3)
C25	0,3322(16)	0,2721(4)	0,2721(4)	0,1170(5)	0,038(3)
H25	0,2562	0,2465	0,2465	0,1252	0,064(7)
C26	1,240(2)	-0,0406(5)	-0,0406(5)	0,3015(6)	0,064(4)
H26	1,366	-0,0496	-0,0496	0,2982	0,064(7)
C27	1,3930(16)	0,0868(5)	0,0868(5)	0,3768(5)	0,043(3)
C28	0,866(2)	-0,0136(4)	-0,0136(4)	0,3153(5)	0,050(3)
H28	0,7411	-0,0047	-0,0047	0,3204	0,064(7)
C29	1,2922(15)	0,1554(4)	0,1554(4)	0,0519(5)	0,039(3)
H29	1,3541	0,1611	0,1611	0,0882	0,064(7)
O30	1,0098(11)	0,2994(3)	0,2994(3)	0,2354(4)	0,053(2)
H30	0,9584	0,2781	0,2781	0,2164	0,04(3)
C31	1,033(2)	0,0599(6)	0,0599(6)	0,5180(6)	0,063(4)
H31	0,9522	0,0542	0,0542	0,5486	0,064(7)
C32	0,9652(17)	0,2242(5)	0,2242(5)	0,4001(6)	0,050(3)
H32	1,0764	0,2225	0,2225	0,3795	0,064(7)
C33	1,1807(15)	0,2859(5)	0,2859(5)	0,2548(5)	0,042(3)
C34	1,1828(17)	0,0050(5)	0,0050(5)	0,2857(5)	0,052(4)
H34	1,2688	0,0259	0,0259	0,2703	0,064(7)
C35	1,0954(14)	0,1497(4)	0,1497(4)	0,0486(5)	0,039(3)
C36	1,2720(16)	0,0777(4)	0,0777(4)	0,4274(5)	0,040(3)
C37	0,4102(15)	0,0339(4)	0,0339(4)	0,1263(5)	0,039(3)
C38	0,636(2)	0,2306(5)	0,2306(5)	0,4633(6)	0,060(4)
H38	0,5266	0,2327	0,2327	0,4845	0,064(7)
C39	1,6184(17)	0,3504(6)	0,3504(6)	0,3088(5)	0,060(4)
H39	1,747	0,3441	0,3441	0,3162	0,064(7)
C40	1,368(2)	0,4057(5)	0,4057(5)	0,3015(6)	0,062(4)
H40	1,3249	0,4364	0,4364	0,3047	0,064(7)
C41	0,926(2)	-0,0587(6)	-0,0587(6)	0,3293(6)	0,063(4)
H41	0,8403	-0,0803	-0,0803	0,3439	0,064(7)
C42	1,3951(16)	0,1527(5)	0,1527(5)	0,0026(5)	0,053(4)
H42	1,526	0,1573	0,1573	0,0054	0,064(7)
C43	1,0930(17)	0,0981(5)	0,0981(5)	0,4276(6)	0,055(4)
H43	1,0529	0,1177	0,1177	0,3967	0,064(7)
C44	0,2547(19)	0,3106(5)	0,3106(5)	0,0849(5)	0,052(4)
H44	0,1268	0,3108	0,3108	0,0728	0,064(7)
C45	1,3061(18)	0,1434(5)	0,1434(5)	-0,0514(6)	0,058(4)
H45	1,3762	0,1412	0,1412	-0,0851	0,064(7)
C46	1,1079(16)	0,1371(5)	0,1371(5)	-0,0549(5)	0,053(4)
H46	1,0468	0,1305	0,1305	-0,0912	0,064(7)
C47	1,209(2)	0,0381(5)	0,0381(5)	0,5185(6)	0,057(4)

H47	1,2479	0,0181	0,0181	0,5491	0,064(7)
C48	0,6373(18)	0,3111(4)	0,3111(4)	0,1221(6)	0,050(3)
H48	0,7658	0,3114	0,3114	0,1335	0,064(7)
C49	0,1723(19)	-0,0246(5)	-0,0246(5)	0,0580(6)	0,055(4)
H49	0,0936	-0,0437	-0,0437	0,0344	0,064(7)
C50	0,9278(15)	0,0655(4)	0,0655(4)	0,2745(5)	0,037(3)
C51	1,0036(16)	0,1406(5)	0,1406(5)	-0,0056(5)	0,045(3)
H51	0,8722	0,1369	0,1369	-0,0083	0,064(7)
C52	0,9742(19)	0,0897(5)	0,0897(5)	0,4730(6)	0,055(4)
H52	0,8555	0,104	0,104	0,4733	0,064(7)
C53	0,2152(16)	0,0365(5)	0,0365(5)	0,1292(6)	0,054(4)
H53	0,1623	0,0583	0,0583	0,1542	0,064(7)
C54	0,5226(15)	0,2727(4)	0,2727(4)	0,1362(5)	0,034(3)
C55	0,3672(18)	-0,0284(5)	-0,0284(5)	0,0554(5)	0,051(3)
H55	0,4184	-0,0507	-0,0507	0,0307	0,064(7)
C56	0,8063(19)	0,2463(5)	0,2463(5)	0,4871(6)	0,057(4)
H56	0,8118	0,2591	0,2591	0,5249	0,064(7)
C57	1,240(2)	0,3706(4)	0,3706(4)	0,2825(6)	0,054(4)
H57	1,1129	0,3777	0,3777	0,2736	0,064(7)
C58	1,4972(17)	0,3138(5)	0,3138(5)	0,2913(5)	0,052(4)
H58	1,5414	0,2832	0,2832	0,2891	0,064(7)
C59	0,0952(18)	0,0068(5)	0,0068(5)	0,0949(6)	0,062(4)
H59	-0,036	0,0086	0,0086	0,0976	0,064(7)
C60	0,6305(17)	0,2116(5)	0,2116(5)	0,4077(6)	0,051(4)
H60	0,5148	0,2012	0,2012	0,3912	0,064(7)
C61	0,369(2)	0,3476(5)	0,3476(5)	0,0719(6)	0,064(4)
H61	0,3181	0,3725	0,3725	0,0498	0,064(7)
C62	0,556(2)	0,3490(5)	0,3490(5)	0,0905(6)	0,063(4)
H62	0,6301	0,3751	0,3751	0,0822	0,064(7)
C63	0,966(2)	0,2436(5)	0,2436(5)	0,4568(6)	0,058(4)
H63	1,0794	0,2549	0,2549	0,4738	0,064(7)
C64	1,111(3)	-0,0716(5)	-0,0716(5)	0,3218(6)	0,064(4)
H64	1,1496	-0,1021	-0,1021	0,3306	0,064(7)
C65	1,553(2)	0,3957(5)	0,3957(5)	0,3154(5)	0,057(4)
H65	1,6348	0,4191	0,4191	0,3292	0,064(7)

Tabelle 128. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OBz})_{2,5}(\text{HOBz})$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Eu1	0,0204(3)	0,0434(4)	0,0367(3)	0,0013(3)	0,0036(2)	0,0009(3)
Eu2	0,0202(3)	0,0446(4)	0,0379(3)	0,0005(3)	0,0039(2)	0,0000(3)
O3	0,039(5)	0,054(6)	0,044(5)	0,014(4)	0,002(4)	-0,002(4)
O4	0,019(4)	0,056(6)	0,046(5)	0,002(4)	0,007(4)	0,001(4)
O5	0,024(4)	0,049(5)	0,050(5)	0,000(4)	-0,008(4)	0,006(4)
O6	0,024(4)	0,055(6)	0,031(4)	0,010(4)	0,005(3)	-0,001(4)
O7	0,027(4)	0,046(5)	0,039(5)	0,006(4)	-0,003(4)	0,003(4)
O8	0,025(4)	0,041(5)	0,042(5)	0,002(4)	0,004(4)	-0,005(4)
O9	0,029(4)	0,062(6)	0,034(4)	-0,001(4)	-0,002(3)	0,004(4)
O10	0,027(4)	0,049(6)	0,061(6)	-0,010(4)	0,005(4)	0,003(4)
O11	0,020(4)	0,043(5)	0,043(4)	0,000(4)	0,007(3)	-0,001(3)
O12	0,024(4)	0,038(5)	0,041(5)	0,005(4)	0,007(4)	0,010(3)

O13	0,040(5)	0,039(5)	0,073(6)	0,002(5)	0,003(4)	0,000(4)
O14	0,034(5)	0,074(7)	0,054(6)	0,007(5)	0,010(4)	0,008(5)
C15	0,024(5)	0,026(7)	0,059(8)	0,007(6)	0,004(5)	0,006(5)
O16	0,025(4)	0,072(6)	0,028(4)	-0,008(4)	0,010(3)	-0,005(4)
C17	0,032(6)	0,051(8)	0,032(7)	-0,003(6)	-0,001(5)	0,001(6)
C18	0,049(7)	0,040(8)	0,041(7)	-0,009(6)	0,005(6)	-0,011(6)
C19	0,038(7)	0,047(8)	0,031(7)	-0,010(6)	0,002(6)	0,004(6)
C20	0,027(6)	0,048(8)	0,027(6)	-0,001(5)	0,003(5)	0,002(6)
C21	0,047(7)	0,032(7)	0,036(7)	0,001(6)	-0,005(6)	0,014(6)
C22	0,078(10)	0,034(8)	0,041(8)	0,007(6)	0,007(7)	0,005(7)
C23	0,027(6)	0,051(8)	0,035(7)	0,000(6)	0,013(5)	-0,004(5)
C24	0,018(6)	0,034(7)	0,059(8)	0,014(6)	-0,005(6)	0,002(5)
C25	0,044(7)	0,034(7)	0,036(7)	0,006(5)	0,009(6)	0,010(6)
C26	0,073(10)	0,065(11)	0,055(9)	-0,009(8)	0,011(8)	0,027(9)
C27	0,032(7)	0,054(9)	0,042(8)	-0,003(7)	-0,001(6)	-0,008(6)
C28	0,064(9)	0,031(8)	0,053(8)	0,012(6)	-0,001(7)	0,000(7)
C29	0,035(6)	0,047(8)	0,034(6)	0,005(6)	0,007(5)	-0,002(6)
O30	0,031(4)	0,060(7)	0,067(7)	-0,013(5)	-0,002(4)	-0,005(4)
C31	0,055(9)	0,089(13)	0,046(9)	-0,006(8)	0,011(7)	-0,028(8)
C32	0,035(7)	0,063(10)	0,053(9)	0,006(7)	0,000(6)	0,001(6)
C33	0,028(7)	0,062(10)	0,038(7)	-0,007(7)	0,014(6)	-0,008(6)
C34	0,044(7)	0,062(10)	0,049(8)	-0,008(7)	-0,013(6)	0,027(7)
C35	0,027(5)	0,043(8)	0,047(7)	0,003(6)	0,007(5)	-0,006(5)
C36	0,032(6)	0,054(9)	0,035(7)	0,008(6)	-0,001(5)	-0,006(6)
C37	0,028(6)	0,052(8)	0,038(7)	-0,001(6)	0,007(5)	0,003(6)
C38	0,051(8)	0,078(11)	0,051(9)	-0,007(8)	0,017(7)	-0,002(8)
C39	0,035(7)	0,100(14)	0,046(8)	-0,034(8)	0,015(6)	-0,019(8)
C40	0,090(12)	0,049(10)	0,049(8)	0,006(7)	0,004(8)	-0,023(8)
C41	0,084(11)	0,068(11)	0,038(8)	-0,004(7)	0,009(8)	-0,018(9)
C42	0,028(6)	0,085(11)	0,046(8)	-0,019(7)	0,008(6)	-0,005(7)
C43	0,038(7)	0,068(10)	0,057(9)	-0,002(7)	-0,006(7)	0,012(7)
C44	0,052(8)	0,057(10)	0,047(8)	-0,009(7)	-0,006(7)	0,018(7)
C45	0,051(8)	0,084(11)	0,041(8)	-0,005(7)	0,019(6)	0,002(8)
C46	0,041(7)	0,086(11)	0,030(7)	-0,012(7)	-0,002(6)	-0,006(7)
C47	0,076(10)	0,054(10)	0,041(8)	0,002(7)	0,006(8)	-0,001(8)
C48	0,045(7)	0,047(9)	0,058(9)	0,003(7)	-0,003(7)	-0,004(6)
C49	0,050(8)	0,061(10)	0,053(9)	-0,023(7)	-0,006(7)	-0,009(7)
C50	0,028(6)	0,052(9)	0,032(6)	0,005(6)	0,002(5)	-0,005(6)
C51	0,030(6)	0,064(9)	0,042(7)	-0,018(7)	0,006(5)	-0,001(6)
C52	0,047(8)	0,066(10)	0,054(9)	-0,015(8)	0,020(7)	-0,005(7)
C53	0,028(6)	0,077(11)	0,057(8)	-0,025(8)	0,003(6)	-0,004(6)
C54	0,029(6)	0,033(7)	0,041(7)	0,005(5)	0,004(5)	0,003(5)
C55	0,052(8)	0,054(9)	0,047(8)	-0,017(7)	0,001(7)	0,009(7)
C56	0,056(9)	0,051(9)	0,064(10)	-0,014(7)	0,005(8)	-0,008(7)
C57	0,062(8)	0,037(9)	0,063(9)	-0,006(7)	-0,004(7)	-0,006(7)
C58	0,041(7)	0,069(10)	0,043(8)	0,000(7)	-0,002(6)	-0,011(7)
C59	0,031(7)	0,076(11)	0,078(10)	-0,026(9)	0,004(7)	-0,002(7)
C60	0,037(7)	0,058(9)	0,060(9)	-0,009(7)	0,009(7)	-0,004(6)
C61	0,066(9)	0,058(11)	0,067(10)	0,023(8)	-0,006(8)	0,013(8)
C62	0,067(9)	0,046(10)	0,076(10)	0,023(8)	-0,012(8)	-0,010(7)
C63	0,060(9)	0,062(10)	0,052(9)	-0,010(7)	-0,010(7)	-0,005(8)
C64	0,103(13)	0,037(9)	0,050(9)	0,014(7)	-0,013(9)	0,012(9)
C65	0,071(10)	0,061(10)	0,039(8)	-0,017(7)	0,001(7)	-0,027(8)

Tabelle 129. Atomabstände/Å von Eu(OBz)_{2,5}(HOBz).

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Eu1	O3	2,469(8)	C19	C60	1,399(16)
Eu1	O13	2,476(9)	C19	C24	1,494(16)
Eu1	O9	2,483(7)	C20	C54	1,500(15)
Eu1	O11	2,502(8)	C21	C28	1,390(17)
Eu1	O8	2,568(8)	C21	C34	1,396(16)
Eu1	O12	2,581(8)	C21	C50	1,481(16)
Eu1	O5	2,659(7)	C22	C36	1,382(15)
Eu1	O4	2,667(7)	C22	C47	1,395(17)
Eu1	Eu2	3,6802(8)	C23	C55	1,395(16)
Eu1	Eu2	3,6883(8)	C23	C37	1,398(15)
Eu2	O16	2,441(7)	C25	C54	1,391(15)
Eu2	O11	2,444(7)	C25	C44	1,412(16)
Eu2	O9	2,449(7)	C26	C64	1,36(2)
Eu2	O10	2,452(8)	C26	C34	1,402(18)
Eu2	O5	2,453(8)	C27	C36	1,482(16)
Eu2	O8	2,471(7)	C28	C41	1,386(18)
Eu2	O4	2,482(7)	C29	C42	1,361(15)
Eu2	O12	2,512(7)	C29	C35	1,393(14)
Eu2	O6	2,567(7)	O30	C33	1,320(13)
Eu2	O7	2,595(8)	C31	C52	1,377(19)
Eu2	C15	2,809(11)	C31	C47	1,389(19)
Eu2	C17	2,813(12)	C32	C63	1,400(17)
O3	C27	1,224(14)	C35	C51	1,387(15)
O4	C24	1,254(12)	C36	C43	1,388(16)
O5	C24	1,292(12)	C37	C53	1,379(15)
O5	Eu1	2,659(7)	C38	C56	1,365(17)
O6	C50	1,270(12)	C38	C60	1,371(17)
O7	C20	1,261(12)	C39	C65	1,382(19)
O8	C20	1,276(13)	C39	C58	1,393(17)
O8	Eu1	2,568(7)	C40	C65	1,356(19)
O9	C15	1,314(12)	C40	C57	1,401(17)
O10	C17	1,250(13)	C41	C64	1,37(2)
O11	C17	1,295(13)	C42	C45	1,377(16)
O11	Eu1	2,502(8)	C43	C52	1,377(17)
O12	C50	1,286(13)	C44	C61	1,368(18)
O13	C33	1,229(14)	C45	C46	1,405(16)
O14	C27	1,317(14)	C46	C51	1,370(15)
C15	O16	1,255(11)	C48	C62	1,403(17)
C15	C35	1,498(15)	C48	C54	1,406(16)
C17	C37	1,495(16)	C49	C59	1,356(17)
C18	C57	1,392(17)	C49	C55	1,380(17)
C18	C58	1,405(16)	C53	C59	1,407(17)
C18	C33	1,493(16)	C56	C63	1,346(18)
C19	C32	1,391(16)	C61	C62	1,368(18)

Tabelle 130. Winkel/° von Eu(OBz)₂(HOBz).

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O3	Eu1	O13	117,6(3)	Eu2	O4	Eu1	91,4(2)
O3	Eu1	O9	140,7(3)	C24	O5	Eu2	93,5(7)
O13	Eu1	O9	91,2(3)	C24	O5	Eu1	173,7(8)
O3	Eu1	O11	88,3(3)	Eu2	O5	Eu1	92,0(2)
O13	Eu1	O11	140,9(3)	C50	O6	Eu2	91,5(6)
O9	Eu1	O11	83,8(2)	C20	O7	Eu2	90,6(7)
O3	Eu1	O8	129,7(2)	C20	O8	Eu2	96,0(6)
O13	Eu1	O8	75,0(3)	C20	O8	Eu1	140,1(7)
O9	Eu1	O8	81,0(2)	Eu2	O8	Eu1	93,8(3)
O11	Eu1	O8	65,9(2)	C15	O9	Eu2	91,5(6)
O3	Eu1	O12	74,4(2)	C15	O9	Eu1	170,7(7)
O13	Eu1	O12	132,3(2)	Eu2	O9	Eu1	96,8(3)
O9	Eu1	O12	66,3(2)	C17	O10	Eu2	93,2(7)
O11	Eu1	O12	80,6(2)	C17	O11	Eu2	92,4(6)
O8	Eu1	O12	135,4(2)	C17	O11	Eu1	170,8(7)
O3	Eu1	O5	69,6(3)	Eu2	O11	Eu1	96,2(3)
O13	Eu1	O5	83,5(3)	C50	O12	Eu2	93,6(6)
O9	Eu1	O5	144,5(2)	C50	O12	Eu1	143,3(7)
O11	Eu1	O5	78,7(2)	Eu2	O12	Eu1	92,8(2)
O8	Eu1	O5	63,7(2)	C33	O13	Eu1	168,4(8)
O12	Eu1	O5	138,7(2)	O16	C15	O9	119,9(10)
O3	Eu1	O4	85,9(2)	O16	C15	C35	120,1(10)
O13	Eu1	O4	70,4(3)	O9	C15	C35	119,9(9)
O9	Eu1	O4	79,2(2)	O16	C15	Eu2	60,2(6)
O11	Eu1	O4	144,9(2)	O9	C15	Eu2	60,6(5)
O8	Eu1	O4	139,4(2)	C35	C15	Eu2	167,9(8)
O12	Eu1	O4	64,5(2)	C15	O16	Eu2	93,4(7)
O5	Eu1	O4	130,3(2)	O10	C17	O11	119,7(11)
O3	Eu1	Eu2	89,92(18)	O10	C17	C37	120,2(11)
O13	Eu1	Eu2	105,9(2)	O11	C17	C37	120,0(10)
O9	Eu1	Eu2	108,09(17)	O10	C17	Eu2	60,5(6)
O11	Eu1	Eu2	41,32(16)	O11	C17	Eu2	60,2(6)
O8	Eu1	Eu2	42,06(16)	C37	C17	Eu2	167,7(8)
O12	Eu1	Eu2	120,69(15)	C57	C18	C58	120,7(12)
O5	Eu1	Eu2	41,78(17)	C57	C18	C33	122,1(11)
O4	Eu1	Eu2	172,12(16)	C58	C18	C33	117,2(12)
O3	Eu1	Eu2	107,40(18)	C32	C19	C60	118,4(11)
O13	Eu1	Eu2	92,28(19)	C32	C19	C24	120,1(11)
O9	Eu1	Eu2	41,25(17)	C60	C19	C24	121,5(10)
O11	Eu1	Eu2	108,18(16)	O7	C20	O8	120,7(10)
O8	Eu1	Eu2	121,09(16)	O7	C20	C54	121,2(11)
O12	Eu1	Eu2	42,87(15)	O8	C20	C54	118,1(9)
O5	Eu1	Eu2	172,61(17)	O7	C20	Eu2	63,6(6)
O4	Eu1	Eu2	42,27(16)	O8	C20	Eu2	58,0(5)
Eu2	Eu1	Eu2	145,60(3)	C54	C20	Eu2	167,6(8)
O16	Eu2	O11	94,9(2)	C28	C21	C34	120,0(12)
O16	Eu2	O9	54,1(2)	C28	C21	C50	119,6(11)
O11	Eu2	O9	143,5(3)	C34	C21	C50	120,3(12)
O16	Eu2	O10	73,5(3)	C36	C22	C47	120,8(13)
O11	Eu2	O10	53,4(3)	C55	C23	C37	118,9(10)
O9	Eu2	O10	95,4(3)	O4	C24	O5	120,1(11)

O16	Eu2	O5	141,6(3)	O4	C24	C19	120,3(9)
O11	Eu2	O5	84,0(2)	O5	C24	C19	119,6(10)
O9	Eu2	O5	131,9(3)	O4	C24	Eu2	60,7(6)
O10	Eu2	O5	130,6(3)	O5	C24	Eu2	59,5(6)
O16	Eu2	O8	75,8(2)	C19	C24	Eu2	177,6(8)
O11	Eu2	O8	68,2(2)	C54	C25	C44	119,8(12)
O9	Eu2	O8	114,2(3)	C64	C26	C34	120,0(14)
O10	Eu2	O8	109,4(2)	O3	C27	O14	124,2(12)
O5	Eu2	O8	68,1(2)	O3	C27	C36	121,7(11)
O16	Eu2	O4	131,5(2)	O14	C27	C36	114,2(11)
O11	Eu2	O4	132,0(2)	C41	C28	C21	119,8(13)
O9	Eu2	O4	83,6(2)	C42	C29	C35	120,9(11)
O10	Eu2	O4	140,3(3)	C52	C31	C47	121,4(13)
O5	Eu2	O4	53,1(2)	C19	C32	C63	118,4(12)
O8	Eu2	O4	107,0(2)	O13	C33	O30	123,4(11)
O16	Eu2	O12	108,8(2)	O13	C33	C18	122,3(11)
O11	Eu2	O12	113,2(2)	O30	C33	C18	114,3(12)
O9	Eu2	O12	67,9(2)	C21	C34	C26	119,0(14)
O10	Eu2	O12	74,7(2)	C51	C35	C29	119,5(11)
O5	Eu2	O12	106,9(2)	C51	C35	C15	119,2(9)
O8	Eu2	O12	174,8(2)	C29	C35	C15	121,3(10)
O4	Eu2	O12	68,2(2)	C22	C36	C43	119,3(12)
O16	Eu2	O6	145,0(3)	C22	C36	C27	121,7(11)
O11	Eu2	O6	73,2(2)	C43	C36	C27	118,8(11)
O9	Eu2	O6	119,6(2)	C53	C37	C23	119,2(11)
O10	Eu2	O6	73,0(3)	C53	C37	C17	121,1(11)
O5	Eu2	O6	71,3(3)	C23	C37	C17	119,7(10)
O8	Eu2	O6	125,8(2)	C56	C38	C60	118,9(13)
O4	Eu2	O6	73,2(2)	C65	C39	C58	121,7(13)
O12	Eu2	O6	51,7(2)	C65	C40	C57	121,2(15)
O16	Eu2	O7	73,8(3)	C64	C41	C28	119,8(14)
O11	Eu2	O7	119,7(2)	C29	C42	C45	120,3(11)
O9	Eu2	O7	73,6(3)	C52	C43	C36	120,7(13)
O10	Eu2	O7	145,6(3)	C61	C44	C25	119,6(12)
O5	Eu2	O7	73,7(3)	C42	C45	C46	119,1(11)
O8	Eu2	O7	51,5(2)	C51	C46	C45	120,8(11)
O4	Eu2	O7	72,1(2)	C31	C47	C22	118,3(13)
O12	Eu2	O7	126,6(2)	C62	C48	C54	119,5(12)
O6	Eu2	O7	140,9(2)	C59	C49	C55	120,2(12)
O16	Eu2	C15	26,5(3)	O6	C50	O12	120,2(11)
O11	Eu2	C15	118,1(3)	O6	C50	C21	121,6(10)
O9	Eu2	C15	27,9(2)	O12	C50	C21	118,1(10)
O10	Eu2	C15	81,1(3)	O6	C50	Eu2	62,5(6)
O5	Eu2	C15	147,4(3)	O12	C50	Eu2	60,0(5)
O8	Eu2	C15	96,7(3)	C21	C50	Eu2	161,7(8)
O4	Eu2	C15	109,9(3)	C46	C51	C35	119,4(10)
O12	Eu2	C15	87,0(3)	C43	C52	C31	119,4(13)
O6	Eu2	C15	135,5(3)	C37	C53	C59	121,0(12)
O7	Eu2	C15	74,4(3)	C25	C54	C48	119,6(10)
O16	Eu2	C17	80,8(3)	C25	C54	C20	120,2(10)
O11	Eu2	C17	27,4(3)	C48	C54	C20	120,1(10)
O9	Eu2	C17	118,5(3)	C49	C55	C23	121,2(12)
O10	Eu2	C17	26,3(3)	C63	C56	C38	121,0(14)
O5	Eu2	C17	109,6(3)	C18	C57	C40	118,9(13)

O8	Eu2	C17	87,4(3)	C39	C58	C18	117,8(14)
O4	Eu2	C17	146,5(3)	C49	C59	C53	119,5(12)
O12	Eu2	C17	95,7(3)	C38	C60	C19	121,7(12)
O6	Eu2	C17	73,9(3)	C44	C61	C62	121,6(13)
O7	Eu2	C17	135,6(3)	C61	C62	C48	119,9(13)
C15	Eu2	C17	97,9(3)	C56	C63	C32	121,6(13)
C27	O3	Eu1	169,7(9)	C26	C64	C41	121,3(14)
C24	O4	Eu2	93,2(7)	C40	C65	C39	119,6(13)
C24	O4	Eu1	175,0(7)				

8.6.4 Europiumbenzoat-Benzoesäure-Addukt, $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$

Tabelle 131. Atomkoordinaten und äquivalente Temperaturfaktoren / $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$.

Atom	x	y	z	Ueq
Eu1	0,47389(2)	0,613720(19)	0,06970(2)	0,02186(7)
Eu2	0,44473(2)	0,886261(19)	0,12333(2)	0,02275(8)
O3	0,5711(3)	0,7546(3)	0,0136(3)	0,0257(7)
O4	0,3543(3)	0,7352(3)	0,1797(3)	0,0263(7)
O5	0,3709(3)	0,9241(3)	-0,0073(3)	0,0310(9)
O6	0,5587(3)	0,5721(3)	0,1956(3)	0,0314(9)
O7	0,2950(3)	0,6714(3)	0,0533(3)	0,0286(8)
O8	0,4105(3)	0,4635(3)	0,1873(3)	0,0271(7)
O9	0,2446(3)	0,8944(3)	0,2117(3)	0,0337(8)
O10	0,3976(3)	1,0830(3)	0,0591(3)	0,0285(8)
O11	0,6242(3)	0,4691(3)	0,0185(3)	0,0269(7)
O12	0,5209(3)	0,6748(3)	-0,1109(3)	0,0262(7)
O13	0,5515(3)	0,7275(3)	0,2186(3)	0,0356(9)
O14	0,3713(3)	0,8998(3)	0,3040(3)	0,0406(9)
C15	0,6293(4)	0,8166(4)	-0,0593(4)	0,0243(10)
C16	0,2575(4)	0,7959(4)	0,2241(4)	0,0263(10)
C17	0,5646(4)	0,6366(4)	-0,1903(4)	0,0258(10)
C18	0,1651(4)	0,7443(4)	0,2948(4)	0,0264(10)
C19	0,2920(4)	0,6104(4)	0,0089(4)	0,0242(10)
C20	0,0698(4)	0,8043(5)	0,3575(4)	0,0331(12)
H20	0,0659	0,8744	0,355	0,063(4)
O21	0,4233(3)	1,0622(3)	-0,1431(3)	0,0387(9)
C22	0,7717(4)	0,6594(4)	-0,1284(4)	0,0320(11)
H22	0,7364	0,6128	-0,0686	0,063(4)
C23	0,2676(4)	1,0141(4)	-0,1233(4)	0,0267(10)
C24	0,5899(4)	0,7158(4)	-0,2957(4)	0,0312(11)
C25	0,1700(4)	0,6396(4)	0,2991(4)	0,0325(11)
H25	0,2336	0,5986	0,2579	0,063(4)
C26	0,7298(4)	0,7718(4)	-0,1415(4)	0,0269(11)
C27	0,1870(4)	0,6316(4)	-0,0107(4)	0,0280(11)
C28	0,3611(4)	0,9982(4)	-0,0887(4)	0,0293(11)
C29	0,0807(5)	0,5960(5)	0,3646(4)	0,0380(13)
H29	0,084	0,5261	0,3669	0,063(4)
C30	0,6523(5)	0,5596(4)	0,3042(4)	0,0340(12)
C31	0,5811(4)	0,6233(4)	0,2346(4)	0,0316(11)

C32	-0,0138(5)	0,6569(5)	0,4268(4)	0,0411(14)
H32	-0,0736	0,6275	0,4709	0,063(4)
C33	0,7832(5)	0,8413(5)	-0,2308(5)	0,0412(14)
H33	0,7573	0,9168	-0,2395	0,063(4)
C34	0,8659(5)	0,6159(5)	-0,2038(5)	0,0407(14)
H34	0,8941	0,5404	-0,1946	0,063(4)
C35	-0,0195(4)	0,7607(5)	0,4236(4)	0,0389(13)
H35	-0,0828	0,8012	0,4654	0,063(4)
C36	0,2004(5)	0,9445(5)	-0,0719(5)	0,0453(15)
H36	0,2158	0,8842	-0,0179	0,063(4)
C37	0,0867(5)	0,6927(5)	0,0457(5)	0,0396(13)
H37	0,0849	0,7203	0,0953	0,063(4)
O38	0,4993(4)	0,7960(7)	0,3821(4)	0,101(3)
H38	0,5326	0,7765	0,3276	0,07(3)
C39	0,1517(6)	1,1224(5)	-0,2317(5)	0,0507(17)
H39	0,1353	1,1827	-0,2853	0,063(4)
C40	0,1890(5)	0,5890(5)	-0,0838(5)	0,0419(14)
H40	0,2557	0,547	-0,1208	0,063(4)
C41	0,6474(5)	0,6787(5)	-0,3857(4)	0,0407(14)
H41	0,6698	0,6041	-0,381	0,063(4)
C42	0,5541(5)	0,8279(5)	-0,3035(5)	0,0444(14)
H42	0,5149	0,8533	-0,2435	0,063(4)
C43	-0,0110(5)	0,7123(5)	0,0277(6)	0,0512(17)
H43	-0,0783	0,753	0,0653	0,063(4)
C44	0,9177(5)	0,6855(5)	-0,2927(5)	0,0463(15)
H44	0,9814	0,6571	-0,3434	0,063(4)
C45	0,0852(5)	1,0533(5)	-0,1790(5)	0,0490(16)
H45	0,023	1,0667	-0,1963	0,063(4)
C46	0,3988(5)	0,8581(6)	0,3832(5)	0,0506(17)
C47	0,1098(5)	0,9642(6)	-0,1004(6)	0,0559(19)
H47	0,0651	0,9163	-0,0658	0,063(4)
C48	0,3195(5)	0,8650(5)	0,4872(5)	0,0442(14)
C49	0,2443(6)	1,1024(5)	-0,2051(5)	0,0452(15)
H49	0,2909	1,1485	-0,2423	0,063(4)
C50	0,6714(6)	0,7529(6)	-0,4828(5)	0,0557(18)
H50	0,7104	0,7281	-0,5431	0,063(4)
C51	0,7386(6)	0,5962(6)	0,2923(6)	0,0523(17)
H51	0,7539	0,6586	0,2403	0,063(4)
C52	0,8747(6)	0,7969(5)	-0,3060(5)	0,0563(18)
H52	0,9082	0,8434	-0,3672	0,063(4)
C53	0,6340(7)	0,4662(6)	0,3776(6)	0,063(2)
H53	0,5808	0,4374	0,3825	0,063(4)
C54	0,0911(6)	0,6097(6)	-0,1010(6)	0,061(2)
H54	0,0923	0,5818	-0,1501	0,063(4)
C55	0,7769(7)	0,4482(6)	0,4370(6)	0,061(2)
H55	0,8168	0,4114	0,4834	0,063(4)
C56	-0,0081(6)	0,6713(6)	-0,0461(6)	0,060(2)
H56	-0,0734	0,6853	-0,0587	0,063(4)
C57	0,2078(6)	0,9069(6)	0,4985(6)	0,0582(18)
H57	0,1854	0,935	0,4401	0,063(4)
C58	0,5773(7)	0,9018(6)	-0,4011(6)	0,060(2)
H58	0,5524	0,9767	-0,4065	0,063(4)
C59	0,8020(6)	0,5394(6)	0,3584(7)	0,064(2)
H59	0,861	0,5626	0,3497	0,063(4)

C60	0,6369(7)	0,8643(6)	-0,4894(6)	0,068(2)
H60	0,6542	0,9139	-0,5543	0,063(4)
C61	0,3537(8)	0,8250(7)	0,5745(6)	0,067(2)
H61	0,4291	0,7978	0,5674	0,063(4)
C62	0,1285(8)	0,9073(8)	0,5970(8)	0,088(3)
H62	0,0528	0,9355	0,6049	0,063(4)
C63	0,6952(8)	0,4136(6)	0,4459(7)	0,080(3)
H63	0,6784	0,3525	0,4992	0,063(4)
C64	0,2732(11)	0,8270(9)	0,6711(6)	0,096(3)
H64	0,295	0,8011	0,7297	0,063(4)
C65	0,1626(11)	0,8657(10)	0,6830(8)	0,109(4)
H65	0,1098	0,8641	0,7494	0,063(4)

Tabelle 132. Anisotrope Temperaturfaktoren/ $10^{-1} \cdot \text{pm}^2$ von $\text{Eu}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_{0,5}$.

Atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
Eu1	0,02420(14)	0,01902(14)	0,02400(15)	-0,00573(11)	-0,00987(12)	-0,00525(11)
Eu2	0,02572(15)	0,01938(14)	0,02497(16)	-0,00622(12)	-0,00900(12)	-0,00681(11)
O3	0,0268(18)	0,0229(18)	0,0270(19)	-0,0055(15)	-0,0070(15)	-0,0094(14)
O4	0,0251(17)	0,0254(18)	0,0281(19)	-0,0105(15)	-0,0062(15)	-0,0062(14)
O5	0,035(2)	0,033(2)	0,031(2)	-0,0016(17)	-0,0183(17)	-0,0134(17)
O6	0,042(2)	0,0248(19)	0,035(2)	-0,0088(17)	-0,0233(18)	-0,0045(16)
O7	0,0262(18)	0,0286(19)	0,034(2)	-0,0117(16)	-0,0134(16)	-0,0031(15)
O8	0,0338(18)	0,0185(17)	0,0254(18)	-0,0024(14)	-0,0084(15)	-0,0085(14)
O9	0,0292(19)	0,0244(19)	0,045(2)	-0,0142(17)	-0,0056(17)	-0,0072(15)
O10	0,0323(18)	0,0191(17)	0,036(2)	-0,0096(15)	-0,0099(16)	-0,0076(14)
O11	0,0247(17)	0,0206(17)	0,0308(19)	-0,0075(15)	-0,0099(15)	0,0000(14)
O12	0,0314(18)	0,0251(18)	0,0222(18)	-0,0071(15)	-0,0072(14)	-0,0085(15)
O13	0,055(2)	0,0207(18)	0,040(2)	-0,0071(16)	-0,0305(19)	-0,0030(16)
O14	0,039(2)	0,051(3)	0,027(2)	-0,0153(19)	-0,0093(17)	-0,0039(18)
C15	0,025(2)	0,028(3)	0,025(3)	-0,007(2)	-0,012(2)	-0,007(2)
C16	0,026(2)	0,028(3)	0,026(3)	-0,008(2)	-0,010(2)	-0,006(2)
C17	0,027(3)	0,024(3)	0,028(3)	-0,004(2)	-0,011(2)	-0,009(2)
C18	0,024(2)	0,031(3)	0,024(3)	-0,009(2)	-0,010(2)	-0,005(2)
C19	0,022(2)	0,025(3)	0,025(3)	-0,006(2)	-0,008(2)	-0,0065(19)
C20	0,028(3)	0,037(3)	0,032(3)	-0,007(2)	-0,012(2)	-0,007(2)
O21	0,046(2)	0,045(2)	0,035(2)	0,0015(18)	-0,0175(18)	-0,0288(19)
C22	0,031(3)	0,029(3)	0,035(3)	-0,010(2)	-0,008(2)	-0,008(2)
C23	0,029(2)	0,030(3)	0,026(3)	-0,004(2)	-0,011(2)	-0,013(2)
C24	0,035(3)	0,032(3)	0,023(3)	0,000(2)	-0,010(2)	-0,011(2)
C25	0,034(3)	0,035(3)	0,030(3)	-0,005(2)	-0,011(2)	-0,013(2)
C26	0,026(2)	0,027(3)	0,031(3)	-0,009(2)	-0,011(2)	-0,007(2)
C27	0,026(2)	0,021(2)	0,039(3)	-0,006(2)	-0,017(2)	-0,003(2)
C28	0,031(3)	0,030(3)	0,028(3)	-0,010(2)	-0,006(2)	-0,011(2)
C29	0,040(3)	0,042(3)	0,033(3)	-0,003(3)	-0,011(3)	-0,021(3)
C30	0,044(3)	0,026(3)	0,041(3)	-0,013(2)	-0,026(3)	-0,001(2)
C31	0,034(3)	0,028(3)	0,034(3)	-0,012(2)	-0,016(2)	-0,002(2)
C32	0,035(3)	0,056(4)	0,030(3)	0,003(3)	-0,012(2)	-0,023(3)
C33	0,045(3)	0,027(3)	0,036(3)	-0,005(3)	-0,002(3)	-0,011(3)
C34	0,036(3)	0,035(3)	0,046(4)	-0,016(3)	-0,009(3)	-0,004(2)
C35	0,025(3)	0,051(4)	0,034(3)	-0,012(3)	-0,007(2)	-0,006(2)

C36	0,049(4)	0,039(3)	0,052(4)	0,009(3)	-0,030(3)	-0,022(3)
C37	0,034(3)	0,035(3)	0,049(4)	-0,013(3)	-0,015(3)	-0,005(2)
O38	0,052(3)	0,191(7)	0,051(3)	-0,071(4)	-0,024(3)	0,021(4)
C39	0,070(4)	0,046(4)	0,045(4)	0,004(3)	-0,039(4)	-0,018(3)
C40	0,042(3)	0,037(3)	0,058(4)	-0,019(3)	-0,027(3)	-0,003(3)
C41	0,044(3)	0,033(3)	0,032(3)	-0,007(3)	-0,010(3)	-0,002(3)
C42	0,063(4)	0,028(3)	0,037(3)	-0,003(3)	-0,018(3)	-0,012(3)
C43	0,027(3)	0,049(4)	0,078(5)	-0,021(4)	-0,024(3)	0,000(3)
C44	0,038(3)	0,045(4)	0,040(4)	-0,019(3)	0,004(3)	-0,006(3)
C45	0,050(4)	0,052(4)	0,053(4)	0,000(3)	-0,035(3)	-0,016(3)
C46	0,041(3)	0,065(4)	0,043(4)	-0,025(3)	-0,015(3)	0,002(3)
C47	0,050(4)	0,060(4)	0,072(5)	0,012(4)	-0,039(4)	-0,035(3)
C48	0,048(4)	0,041(3)	0,035(3)	-0,017(3)	-0,002(3)	-0,010(3)
C49	0,065(4)	0,042(4)	0,040(4)	0,007(3)	-0,030(3)	-0,029(3)
C50	0,052(4)	0,058(4)	0,025(3)	-0,002(3)	-0,004(3)	-0,003(3)
C51	0,054(4)	0,046(4)	0,064(5)	-0,013(3)	-0,031(4)	-0,010(3)
C52	0,054(4)	0,042(4)	0,042(4)	-0,007(3)	0,007(3)	-0,012(3)
C53	0,086(5)	0,042(4)	0,075(5)	0,019(4)	-0,058(5)	-0,030(4)
C54	0,058(4)	0,061(4)	0,092(6)	-0,035(4)	-0,049(4)	-0,003(3)
C55	0,077(5)	0,054(4)	0,063(5)	-0,022(4)	-0,049(4)	0,007(4)
C56	0,042(4)	0,056(4)	0,103(6)	-0,027(4)	-0,045(4)	-0,003(3)
C57	0,054(4)	0,060(4)	0,054(4)	-0,027(4)	0,000(3)	-0,018(3)
C58	0,091(6)	0,029(3)	0,048(4)	0,008(3)	-0,027(4)	-0,019(4)
C59	0,060(4)	0,065(5)	0,095(6)	-0,037(5)	-0,050(4)	-0,001(4)
C60	0,075(5)	0,057(5)	0,038(4)	0,018(4)	-0,013(4)	-0,022(4)
C61	0,086(6)	0,069(5)	0,044(4)	-0,021(4)	-0,019(4)	-0,017(4)
C62	0,065(5)	0,104(7)	0,080(7)	-0,055(6)	0,028(5)	-0,037(5)
C63	0,111(7)	0,047(5)	0,088(7)	0,022(4)	-0,071(6)	-0,022(5)
C64	0,158(11)	0,105(8)	0,029(4)	-0,017(5)	-0,012(6)	-0,062(8)
C65	0,136(10)	0,134(10)	0,047(6)	-0,039(6)	0,035(6)	-0,084(9)

Tabelle 133. Atomabstände/Å von Eu(OBz)₃(HOBz)_{0,5}.

Atom 1	Atom 2	Abstand	Atom 1	Atom 2	Abstand
Eu1	O11	2,315(3)	C20	C35	1,387(8)
Eu1	O8	2,323(3)	O21	C28	1,271(6)
Eu1	O12	2,326(3)	O21	Eu2	2,355(3)
Eu1	O7	2,371(3)	C22	C26	1,385(7)
Eu1	O6	2,380(3)	C22	C34	1,387(8)
Eu1	O4	2,389(3)	C23	C36	1,373(8)
Eu1	O3	2,470(3)	C23	C49	1,389(7)
Eu1	O11	2,948(3)	C23	C28	1,496(7)
Eu1	C19	3,031(4)	C24	C41	1,388(8)
Eu1	Eu2	3,9488(6)	C24	C42	1,394(8)
Eu1	Eu1	4,0406(6)	C25	C29	1,387(8)
Eu2	O5	2,349(3)	C26	C33	1,392(8)
Eu2	O21	2,355(3)	C27	C37	1,389(7)
Eu2	O13	2,408(3)	C27	C40	1,394(7)
Eu2	O10	2,410(3)	C29	C32	1,389(9)
Eu2	O14	2,453(4)	C30	C53	1,354(9)
Eu2	O9	2,470(4)	C30	C51	1,389(8)

Eu2	O3	2,495(3)	C30	C31	1,512(7)
Eu2	O4	2,527(3)	C32	C35	1,380(9)
Eu2	O10	2,630(4)	C33	C52	1,374(8)
Eu2	C16	2,870(5)	C34	C44	1,381(8)
Eu2	C15	2,956(5)	C36	C47	1,385(8)
Eu2	Eu2	3,9421(8)	C37	C43	1,390(8)
O3	C15	1,271(6)	O38	C46	1,308(7)
O4	C16	1,300(6)	C39	C45	1,361(9)
O5	C28	1,259(6)	C39	C49	1,394(8)
O6	C31	1,247(6)	C40	C54	1,382(8)
O7	C19	1,265(6)	C41	C50	1,389(8)
O8	C17	1,266(6)	C42	C58	1,391(9)
O9	C16	1,242(6)	C43	C56	1,381(9)
O10	C15	1,279(6)	C44	C52	1,373(9)
O10	Eu2	2,630(4)	C45	C47	1,370(8)
O11	C19	1,277(6)	C46	C48	1,458(9)
O11	Eu1	2,948(3)	C48	C57	1,374(9)
O12	C17	1,269(6)	C48	C61	1,398(9)
O13	C31	1,279(6)	C50	C60	1,388(10)
O14	C46	1,237(7)	C51	C59	1,392(9)
C15	O10	1,279(6)	C53	C63	1,395(9)
C15	C26	1,486(7)	C54	C56	1,376(10)
C16	C18	1,488(7)	C55	C63	1,328(11)
C17	O8	1,266(6)	C55	C59	1,384(11)
C17	C24	1,500(7)	C57	C62	1,388(10)
C18	C25	1,391(7)	C58	C60	1,371(11)
C18	C20	1,391(7)	C61	C64	1,376(12)
C19	O11	1,277(6)	C62	C65	1,378(15)
C19	C27	1,496(6)	C64	C65	1,359(15)

Tabelle 134. Winkel/° von Eu(OBz)₃(HOBz)_{0,5}.

Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi	Atom 1	Atom 2	Atom 3	phi
O11	Eu1	O8	78,29(12)	O14	Eu2	Eu2	124,46(10)
O11	Eu1	O12	78,88(12)	O9	Eu2	Eu2	123,20(9)
O8	Eu1	O12	131,27(12)	O3	Eu2	Eu2	85,90(8)
O11	Eu1	O7	128,20(12)	O4	Eu2	Eu2	141,59(8)
O8	Eu1	O7	81,52(12)	O10	Eu2	Eu2	36,59(7)
O12	Eu1	O7	79,83(12)	C16	Eu2	Eu2	139,50(9)
O11	Eu1	O6	81,37(12)	C15	Eu2	Eu2	61,56(10)
O8	Eu1	O6	80,34(12)	C15	O3	Eu1	149,5(3)
O12	Eu1	O6	136,91(13)	C15	O3	Eu2	98,1(3)
O7	Eu1	O6	140,60(13)	Eu1	O3	Eu2	105,38(12)
O11	Eu1	O4	155,11(12)	C16	O4	Eu1	152,7(3)
O8	Eu1	O4	94,69(12)	C16	O4	Eu2	91,4(3)
O12	Eu1	O4	121,61(12)	Eu1	O4	Eu2	106,86(13)
O7	Eu1	O4	73,11(11)	C28	O5	Eu2	137,6(3)
O6	Eu1	O4	73,89(12)	C31	O6	Eu1	137,6(3)
O11	Eu1	O3	100,15(12)	C19	O7	Eu1	109,2(3)
O8	Eu1	O3	152,90(11)	C17	O8	Eu1	135,6(3)
O12	Eu1	O3	73,63(11)	C16	O9	Eu2	95,6(3)

O7	Eu1	O3	117,97(11)	C15	O10	Eu2	158,6(3)
O6	Eu1	O3	72,72(12)	C15	O10	Eu2	91,6(3)
O4	Eu1	O3	75,26(11)	Eu2	O10	Eu2	102,83(12)
O11	Eu1	O11	80,39(11)	C19	O11	Eu1	179,0(3)
O8	Eu1	O11	68,23(11)	C19	O11	Eu1	81,3(3)
O12	Eu1	O11	65,87(11)	Eu1	O11	Eu1	99,61(11)
O7	Eu1	O11	47,81(10)	C17	O12	Eu1	139,7(3)
O6	Eu1	O11	146,19(11)	C31	O13	Eu2	138,4(3)
O4	Eu1	O11	119,48(10)	C46	O14	Eu2	138,9(4)
O3	Eu1	O11	138,65(10)	O3	C15	O10	119,2(4)
O11	Eu1	C19	104,99(12)	O3	C15	C26	120,3(4)
O8	Eu1	C19	73,94(12)	O10	C15	C26	120,5(5)
O12	Eu1	C19	71,34(12)	O3	C15	Eu2	56,7(2)
O7	Eu1	C19	23,21(12)	O10	C15	Eu2	62,8(3)
O6	Eu1	C19	151,39(13)	C26	C15	Eu2	172,6(3)
O4	Eu1	C19	95,70(12)	O9	C16	O4	120,0(5)
O3	Eu1	C19	131,33(12)	O9	C16	C18	120,8(4)
O11	Eu1	C19	24,61(11)	O4	C16	C18	119,1(4)
O11	Eu1	Eu2	133,71(8)	O9	C16	Eu2	58,9(3)
O8	Eu1	Eu2	128,57(8)	O4	C16	Eu2	61,6(2)
O12	Eu1	Eu2	97,86(8)	C18	C16	Eu2	169,1(3)
O7	Eu1	Eu2	95,65(8)	O8	C17	O12	125,0(5)
O6	Eu1	Eu2	69,88(8)	O8	C17	C24	117,4(4)
O4	Eu1	Eu2	37,76(8)	O12	C17	C24	117,5(4)
O3	Eu1	Eu2	37,53(8)	C25	C18	C20	119,1(5)
O11	Eu1	Eu2	140,65(6)	C25	C18	C16	122,5(4)
C19	Eu1	Eu2	117,74(9)	C20	C18	C16	118,4(5)
O11	Eu1	Eu1	46,00(8)	O7	C19	O11	121,7(4)
O8	Eu1	Eu1	67,24(8)	O7	C19	C27	118,9(4)
O12	Eu1	Eu1	65,88(8)	O11	C19	C27	119,4(4)
O7	Eu1	Eu1	82,20(8)	O7	C19	Eu1	47,6(2)
O6	Eu1	Eu1	121,34(8)	O11	C19	Eu1	74,0(2)
O4	Eu1	Eu1	151,49(8)	C27	C19	Eu1	166,5(3)
O3	Eu1	Eu1	130,44(8)	C35	C20	C18	120,7(5)
O11	Eu1	Eu1	34,39(6)	C28	O21	Eu2	137,0(3)
C19	Eu1	Eu1	59,00(9)	C26	C22	C34	120,5(5)
Eu2	Eu1	Eu1	163,737(12)	C36	C23	C49	119,0(5)
O5	Eu2	O21	137,37(13)	C36	C23	C28	120,6(5)
O5	Eu2	O13	136,61(12)	C49	C23	C28	120,4(5)
O21	Eu2	O13	71,23(13)	C41	C24	C42	119,7(5)
O5	Eu2	O10	75,23(12)	C41	C24	C17	120,7(5)
O21	Eu2	O10	75,36(12)	C42	C24	C17	119,6(5)
O13	Eu2	O10	145,77(12)	C29	C25	C18	120,3(5)
O5	Eu2	O14	136,73(13)	C22	C26	C33	119,6(5)
O21	Eu2	O14	73,74(14)	C22	C26	C15	119,6(5)
O13	Eu2	O14	72,63(13)	C33	C26	C15	120,9(5)
O10	Eu2	O14	91,24(13)	C37	C27	C40	119,9(5)
O5	Eu2	O9	73,26(13)	C37	C27	C19	119,7(5)
O21	Eu2	O9	136,70(13)	C40	C27	C19	120,4(5)
O13	Eu2	O9	108,92(13)	O5	C28	O21	125,1(5)
O10	Eu2	O9	90,37(12)	O5	C28	C23	117,8(4)
O14	Eu2	O9	65,80(13)	O21	C28	C23	117,1(5)
O5	Eu2	O3	72,77(12)	C25	C29	C32	119,8(6)
O21	Eu2	O3	100,53(13)	C53	C30	C51	119,3(5)

O13	Eu2	O3	69,47(12)	C53	C30	C31	120,8(5)
O10	Eu2	O3	124,99(11)	C51	C30	C31	119,9(5)
O14	Eu2	O3	141,34(12)	O6	C31	O13	125,4(4)
O9	Eu2	O3	120,51(11)	O6	C31	C30	118,8(4)
O5	Eu2	O4	74,89(12)	O13	C31	C30	115,8(4)
O21	Eu2	O4	144,72(12)	C35	C32	C29	120,5(5)
O13	Eu2	O4	74,04(12)	C52	C33	C26	119,2(6)
O10	Eu2	O4	137,53(11)	C44	C34	C22	119,5(5)
O14	Eu2	O4	90,28(13)	C32	C35	C20	119,6(5)
O9	Eu2	O4	52,28(11)	C23	C36	C47	120,0(5)
O3	Eu2	O4	72,44(10)	C27	C37	C43	119,7(6)
O5	Eu2	O10	71,52(12)	C45	C39	C49	119,8(6)
O21	Eu2	O10	72,35(12)	C54	C40	C27	119,5(6)
O13	Eu2	O10	99,25(12)	C24	C41	C50	120,1(6)
O10	Eu2	O10	77,17(12)	C58	C42	C24	119,9(6)
O14	Eu2	O10	145,93(12)	C56	C43	C37	120,1(6)
O9	Eu2	O10	144,57(12)	C52	C44	C34	119,7(5)
O3	Eu2	O10	50,75(10)	C39	C45	C47	120,0(5)
O4	Eu2	O10	119,92(10)	O14	C46	O38	122,7(6)
O5	Eu2	C16	74,31(13)	O14	C46	C48	122,8(6)
O21	Eu2	C16	147,09(13)	O38	C46	C48	114,2(6)
O13	Eu2	C16	90,49(13)	C45	C47	C36	120,8(6)
O10	Eu2	C16	114,69(13)	C57	C48	C61	120,2(6)
O14	Eu2	C16	74,75(14)	C57	C48	C46	117,9(6)
O9	Eu2	C16	25,52(12)	C61	C48	C46	121,9(6)
O3	Eu2	C16	98,05(12)	C23	C49	C39	120,3(6)
O4	Eu2	C16	26,93(12)	C60	C50	C41	119,6(6)
O10	Eu2	C16	139,20(12)	C30	C51	C59	119,9(7)
O5	Eu2	C15	71,49(13)	C44	C52	C33	121,5(6)
O21	Eu2	C15	85,21(13)	C30	C53	C63	119,6(7)
O13	Eu2	C15	82,78(13)	C56	C54	C40	120,6(6)
O10	Eu2	C15	101,83(13)	C63	C55	C59	119,5(6)
O14	Eu2	C15	151,60(12)	C54	C56	C43	120,2(5)
O9	Eu2	C15	138,05(12)	C48	C57	C62	120,1(8)
O3	Eu2	C15	25,20(12)	C60	C58	C42	120,1(6)
O4	Eu2	C15	96,51(12)	C55	C59	C51	119,6(7)
O10	Eu2	C15	25,62(12)	C58	C60	C50	120,6(6)
C16	Eu2	C15	120,32(13)	C64	C61	C48	118,4(9)
O5	Eu2	Eu2	68,45(9)	C65	C62	C57	119,5(9)
O21	Eu2	Eu2	69,10(9)	C55	C63	C53	121,9(8)
O13	Eu2	Eu2	127,78(10)	C65	C64	C61	121,6(9)
O10	Eu2	Eu2	40,58(8)	C64	C65	C62	120,2(9)

9 Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle vor allem bei Hr. Prof. Gerd Meyer bedanken, der mich bereits seit der Diplomarbeit betreut, nie an dem Erfolg meiner Arbeit gezweifelt und mich stets unterstützt hat. Bei Hr. Prof. Axel Klein bedanke ich mich für die Übernahme des Koreferats.

Mein Dank gilt auch vielen Mitarbeitern und Kollegen des Instituts für Anorganische Chemie an der Universität zu Köln. Zunächst möchte ich mich bei Hr. Dr. Ingo Pantenburg und Fr. Ingrid Müller für die durchgeführten Einkristallmessungen sehr bedanken. Vielen Dank vor allem für die vielen Tieftemperaturmessungen, sowie den großen Zeit- und Arbeitsaufwand bei den empfindlichen Kristallen. Besonders bedanke ich mich bei Hr. Dr. Ingo Pantenburg für all die nützlichen Gespräche zu den Einkristallstrukturlösungen. Bei Hr. Horst Schumacher bedanke ich mich für die vielen Pulver-Röntgenaufnahmen, bei Hr. Peter Kliesen für die IR- und Raman-Messungen. Bei den Mitarbeitern aus Labor 407 bedanke ich mich für die nette Atmosphäre und für die vielen netten Gespräche. Den anderen nicht namentlich erwähnten Mitgliedern des Arbeitskreises Meyer gilt ebenfalls mein Dank. Mein Dank gilt ebenfalls dem cand. Chem. Markus Kaiser aus dem Arbeitskreis von Hr. Prof. Klaus Meerholz am Institut für Physikalische Chemie für die Messungen am Rasterelektronenmikroskop sowie am EDX.

Mein Dank gilt auch vielen Mitarbeitern anderer Universitäten. Aus dem Arbeitskreis von Fr. Prof. Anja-Verena Mudring, seit Januar an der Universität Bochum, gilt mein Dank der Dipl.-Chem. Anna Getsis für die thermischen Untersuchungen nach der Methode der Differenz-Scanning-Kalorimetrie und Hr. Dr. Arash Babai für die Lumineszenzmessungen. Aus dem Arbeitskreis von Fr. Prof. Claudia Felser an der Universität Mainz gilt mein Dank Hr. Dr. Vadim Ksenofontov und Dipl.-Chem. Frederick Casper für die Mössbauer- und für die magnetischen Messungen sowie der anschließenden, gemeinsamen Auswertung der Daten.

Besonders gilt mein Dank meinen Eltern, ohne deren finanzielle und moralische Unterstützung der erfolgreiche Abschluss meines Studiums in diesem Zeitraum nicht möglich gewesen wäre. Ich bedanke mich insbesondere bei meinem Freund Pedro und bei all meinen Freunden für ihre Unterstützung und für ihr Verständnis.

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbstständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben habe und die Stellen der Arbeit – einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen –, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; dass diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegen hat; dass sie noch nicht veröffentlicht worden ist sowie, dass ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluss des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmung der geltenden Promotionsordnung ist mir bekannt. Die von mir vorgelegte Dissertation ist von Prof. Dr. Gerd Meyer betreut worden.

Publikationen:

- (1) S. Gomez Torres, I. Pantenburg, G. Meyer, „*Direct Oxidation of Europium Metal with Acetic Acid: Anhydrous Europium(III) Acetate, $\text{Eu}(\text{OAc})_3$, its Sesquihydrate, $\text{Eu}(\text{OAc})_3(\text{H}_2\text{O})_{1.5}$, and the “Hydrogendiacetate”, $\text{Eu}[\text{H}(\text{OAc})_2]_3(\text{H}_2\text{O})$ ”*“, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 632, 1989 – 1994, 2006.
- (2) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*Zwei Hydroacetate der Seltenerdmetalle*“, *Z. Krist. Suppl.*, 24, 155, 2006.
- (3) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*A first anhydrous praseodymium benzoate-benzoic acid adduct, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$* “, *J. Alloys Compd.*, im Druck, 2007.
- (4) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*Anhydrous Neodymium(III) Acetate*“, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 633, eingereicht, 2007.
- (5) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*Structural, spectroscopic and magnetic properties of the first anhydrous benzoate of iron, $\text{Fe}_2(\text{OBz})_4$* “, *Inorg. Chem.*, nicht veröffentlicht, 2007.
- (6) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*Preparation and characterization of the first anhydrous europium benzoate-benzoic acid adducts: $\text{Eu}_2(\text{OBz})_5(\text{HOBz})_2$ (1) and $\text{Eu}_2(\text{OBz})_6(\text{HOBz})$ (2)*“, *Inorg. Chem.*, nicht veröffentlicht, 2007.
- (7) K. Müller-Buschbaum, S. Gomez-Torres, „*Crystal Engineering of Rare Earth Amides: $^3_\infty[\text{Tb}(\text{Im})_3]@\text{NH}_3$, a Homoleptic 3D Network Exhibiting Strong Luminescence*“, *Chem. Mater.*, 19, 655-659, 2007.

Tagungsbeiträge

- (1) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*Zwei Hydroacetate der Seltenerdmetalle*“, 14. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Freiburg, Deutschland 3.4 – 6.4.2006.
- (2) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*A first anhydrous praseodymium benzoate-benzoic acid adduct, $\text{Pr}(\text{OBz})_3(\text{HOBz})_2$* “, 6th International Conference on f-elements, Wroclaw, Poland 4.9 – 9.9.2006.
- (3) S. Gomez Torres, G. Meyer, V. Ksenofontov, C. Felser, „*A mixed-valent anhydrous benzoate of europium: $\text{Eu}_2(\text{OBz})_5(\text{HOBz})_2$* “, XIX Tage der Seltenen Erden, Terrae Rarae 2006, Oldenburg 29.11 – 2.12.2006.
- (4) S. Gomez Torres, G. Meyer, „*The anhydrous gadolinium benzoate $\text{Gd}_3(\text{OBz})_9$* “, 15. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Bremen, Deutschland 5.3 – 9.3.2007.
- (5) S. Gomez Torres, J. Sierau, G. Meyer, „*Two new anhydrous iron(II) benzoates, $\text{Fe}(\text{OBz})_2$ and $\text{Fe}(\text{OBz})_2(\text{HOBz})_{1/3}$* “, 15. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Bremen, Deutschland 5.3 – 9.3.2007.